

DANIEL ANTONIAZZI RIBEIRO MENDES

**APLICAÇÃO DO MODELO QUAL2Kw PARA AVALIAÇÃO DE CARGAS
PONTUAIS NO RIO ITAPANHAÚ**

**Dissertação apresentada à Escola
Politécnica de Engenharia da Universidade
de São Paulo para obtenção do título de
Mestre em Engenharia.**

São Paulo

2010

DANIEL ANTONIAZZI RIBEIRO MENDES

**APLICAÇÃO DO MODELO QUAL2Kw PARA AVALIAÇÃO DE CARGAS
PONTUAIS NO RIO ITAPANHAÚ**

**Dissertação apresentada à Escola
Politécnica de Engenharia da Universidade
de São Paulo para obtenção do título de
Mestre em Engenharia.**

Área de concentração:

Meio Ambiente e Recursos Hídricos

Orientador: Prof. Dra. Monica Porto

São Paulo

2010

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, de maio de 2010.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

FICHA CATALOGRÁFICA

Mendes, Daniel Antoniazzi Ribeiro

**Aplicação do modelo QUAL2Kw para avaliação de cargas pontuais no Rio Itapanhá / D.A.R. Mendes. -- São Paulo, 2010.
206 p.**

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária.

1. Modelos matemáticos 2. Recursos hídricos 3. Qualidade da água I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária II. t.

Esse trabalho é dedicado à Dona Lourdes, avó eterna que deixa saudades eternas.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer à Profa. Monica Porto pelo desafio, estímulo e atenção para o andamento do trabalho.

Ao Prof. José Rodolfo Scarati Martins pela contribuição e pelos sábios conselhos.

À minha mulher Roberta, que me ajudou a conduzir esse trabalho e me apoiou nas dificuldades e entendeu a minha indisponibilidade em muitos momentos.

Aos meus pais, Carla e Carlão, pela educação, participação na minha vida e por me estimularem a alcançar meus objetivos.

Ao Prof. Luizmar Seabra Pereira pela amizade e ensinamentos, inclusive aos sábados, domingos e feriados.

Aos Engs. Godoy e Daniel por viabilizarem esse sonho.

Aos colegas que ajudaram nas análises e nas coletas das amostras.

SUMÁRIO

RESUMO	15
ABSTRACT	16
1. INTRODUÇÃO	17
2. OBJETIVOS	19
2.1. Objetivo geral.....	19
2.2. Objetivos específicos.....	19
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	20
3.1. Aspectos legais referentes aos recursos hídricos na escala federal: a Resolução CONAMA 357/05.....	20
3.2. Aspectos hidrológicos	22
3.3. Comportamento dos poluentes em rios	28
3.4. Modelos de simulação de qualidade de água	31
3.4.1. Cargas e cinética das reações.....	38
3.4.2. Modelo de Streeter-Phelps	40
3.4.3. Transporte de massa em rios	43
3.4.4. Modelos de cargas pontuais.....	45
3.4.5. Modelos de cargas difusas	46

3.4.6.	Modelos ecológicos	46
3.4.7.	Calibração de modelos de qualidade de água.....	47
3.4.7.1.	Avaliação do ajuste do modelo.....	48
3.4.7.2.	Aplicação de algoritmos genéticos para calibração de modelos	50
3.4.8.	Validação.....	57
3.4.9.	Análise da Incerteza	58
3.4.10.	Análise de sensibilidade de modelos.....	59
3.4.11.	Seleção de modelos de qualidade de água.....	61
3.5.	O modelo QUAL2Kw.....	65
3.5.1.	Balanço de vazão	68
3.5.2.	Características hidráulicas.....	70
3.5.3.	Constituintes do modelo e balanço de massa geral	73
3.5.4.	PIKAIA - algoritmo genético de autocalibração do QUAL2Kw	77
3.5.5.	Configuração do QUAL2Kw.....	82
3.6.	Fundamentos teóricos do mecanismo das marés	83
3.7.	O aplicativo CLIV para a determinação da linha d'água em escoamentos transitórios	84
4.	METODOLOGIA	86

4.1.	Área de estudo.....	87
4.2.	Amostragem e dados a serem simulados	92
4.3.	Definição das condições hidrodinâmicas e hidrológicas.....	100
4.4.	Definição dos cenários	103
4.5.	Configuração do modelo QUAL2Kw	106
5.	APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS E DISCUSSÃO	109
5.1.	Amplitudes e fases obtidas pela análise harmônica.....	109
5.2.	Resultados do CLIV e determinação dos coeficientes de descarga.....	114
5.3.	Determinação dos coeficientes de descarga.....	116
5.4.	Calibração do modelo	123
5.5.	Validação.....	128
5.6.	Apresentação das simulações dos respectivos cenários	131
5.7.	Análise da incerteza	144
5.8.	Análise de sensibilidade	145
6.	CONSIDERAÇÕES FINAIS	147
7.	RECOMENDAÇÕES.....	149
8.	BIBLIOGRAFIA.....	151

9.	ANEXO A – TRANSCRIÇÃO DO MANUAL DO QUAL2Kw	158
9.1.	Tempo de trânsito.....	158
9.2.	Dispersão longitudinal	158
9.3.	Modelo de temperatura	158
9.4.	Reações fundamentais.....	166
9.5.	Reações constituintes sem a consideração da zona hiporreica	169
9.6.	Reações constituintes na água intersticial da zona hiporreica (Nível 1).....	185
9.7.	Reações constituintes na água intersticial da zona hiporreica (Nível 2).....	189
9.8.	Modelo do Fluxo de Nutrientes e Demanda de Oxigênio do Sedimento	192
10.	ANEXO B – COEFICIENTES OBTIDOS NA CALIBRAÇÃO	200

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Resolução da equação 10 para diferentes ordens de reação ao se considerar $c=c_0$ em $t=0$	40
Tabela 2 - Coeficiente de rugosidade de Manning (Fonte: Chow, 1959).	71
Tabela 3 – Valores típicos dos expoentes das curvas-chave usados para determinar a velocidade e profundidade pela vazão (Pelletier <i>et al</i> , 2008).	72
Tabela 4 - Variáveis simuladas no QUAL2Kw.....	73
Tabela 5 – Coeficientes do PIKAIA na aba “RATES” do QUAL2Kw.	80
Tabela 6 - Principais componentes da maré na costa brasileira (Martins, 2008). ..	84
Tabela 7 – Localização e identificação dos pontos amostrados.	93
Tabela 8 – Variáveis de qualidade de água medidas dos pontos amostrados.....	94
Tabela 9 – $Q_{95\%}$ obtida para os períodos seco e chuvoso a partir de uma série de dados diários de novembro de 2006 a julho de 2008.....	105
Tabela 10 - Amplitudes e fases das constantes harmônicas no ponto Q3.	110
Tabela 11 - Coeficientes de descarga para cada seção e para cada NA de jusante.	122
Tabela 12 – Parâmetros utilizados no PIKAIA para a calibração do modelo.	123
Tabela 13 – Mediana das variáveis de qualidade de água e vazões de lançamento e captação com permanência de 95% para os períodos seco e chuvoso de janeiro de 2006 a dezembro de 2009.	132

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 – Fluviograma do Rio Paraopeba em Ponte Nova do Paraopeba 1962/1963 (Fonte: Naghettini & Pinto, 2007).	23
Figura 2 – Curva de permanência das vazões do Rio Paraopeba em Ponte Nova do Paraopeba (Fonte: Naghettini & Pinto, 2007).	26
Figura 3 – Exemplificação de três curvas de permanência construídas com base nas vazões médias diárias de estações fluviométricas de três rios distintos (Fonte: von Sperling, 2007).	27
Figura 4 – Processo de autodepuração. Fonte: Braga <i>et al</i> (2005).	31
Figura 5 – Cenário aproximado do nível de esforço de pesquisa aplicado ao desenvolvimento de modelos associados a problemas de qualidade – Fonte: Martins (1988).	36
Figura 6 – Desenvolvimento em duas fases do trabalho original de Streeter e Phelps – Fonte: Martins (1988).	37
Figura 7 – Representação do transporte de uma substância no espaço e no tempo devido à advecção e difusão, representados pelo gráfico à esquerda e direita, respectivamente (von Sperling, 2007)	44
Figura 8 – Diagrama esquemático do processo de calibração de modelos - Fonte: adaptação de Chapra (1997).	47
Figura 9 – Representação de AG típico (Kondageski, 2008).	57
Figura 10 – Fluxograma da análise da incerteza (adaptado de von Sperling, 2007).	59
Figura 11 – Fluxograma da análise de sensibilidade (adaptado de von Sperling, 2007).	61

Figura 12 – Confiabilidade versus complexidade de modelos: (A) modelagem isolada de decisões; (B) modelagem influenciada pelo contexto das decisões - Fonte: adaptação de Chapra (2003).	62
Figura 13 – Esquema de segmentação do QUAL2Kw (FONTE: Pelletier <i>et al</i> , 2008).	66
Figura 14 – Divisão dos trechos em elementos (FONTE: Pelletier <i>et al</i> , 2008).	67
Figura 15 – Ilustração do balanço de vazões (FONTE: Pelletier <i>et al</i> , 2008).	69
Figura 16 – Representação das cargas difusas no modelo QUAL2Kw (FONTE: Pelletier <i>et al</i> , 2008).	69
Figura 17 – Esquema para determinação da vazão no modelo QUAL2Kw (FONTE: Pelletier <i>et al</i> , 2008).	70
Figura 18 – Balanço de massa (FONTE: Pelletier <i>et al</i> , 2008).	74
Figura 19 – Cinética do modelo e processos de transferência de massa. As variáveis de estado são definidas na Tabela 4. (FONTE: Pelletier <i>et al</i> , 2008).	76
Figura 20 – Fluxograma do algoritmo genético utilizado no QUAL2Kw (adaptado de Pelletier <i>et al</i> , 2006).	78
Figura 21 – Interface gráfica do usuário no QUAL2Kw.....	82
Figura 22 – Significado físico das variáveis das Equações de Saint-Venant (Martins ¹ , 2008).	85
Figura 24 – Localização da Bacia da Baixada Santista (UGRHI 7) no estado de São Paulo.	87
Figura 25 – Localização e traçado da Bacia do Rio Itapanhaú com exultória em 23°45'24"S e 46° 3'7"O através das Cartas IBGE de Salesópolis, Mogi das Cruzes e Bertiooga (MI-2795-1/3, MI-2794-2 e MI-2794-4).	88
Figura 26 – Traçado da parcela de interesse da bacia do Rio Itapanhaú com os rios e a identificação dos pontos de amostragem de qualidade de água.	89

Figura 27 – Foto de satélite da região em estudo (Fonte: Google Earth).....	90
Figura 28 – Chuva média mensal no período de maio de 1948 a abril de 2001 registrada pelo Posto E3-106 do DAEE, nas coordenadas 23°51' S e 46°08'.....	92
Figura 29 – Identificação e fotos do trecho do rio em relação aos pontos amostrados.	93
Figura 30 – Ponto Q1 (a) e Q2 (b, onde estão as duas captações).	95
Figura 31 – Fotos do ponto Q3, trecho ainda bem preservado do Rio Itapanhaú..	95
Figura 32 – Fotos dos pontos Q4 (a e b, onde é possível identificar a mata ciliar preservada e resquícios das instalações de antigos portos de areia) e Q5 (c e d presença de sub-habitações).	96
Figura 33 – Encontro das águas dos rios Bananal e Itapanhaú (a) e coleta de amostra para DBO e OD no Rio Bananal (b).	96
Figura 34 – Foto do frasco do inibidor de nitrificação (a) e peagâmetro (b).....	99
Figura 35 – Condutivímetro HANNA PWT (a) e espectrofotômetro HACH DR5000 (b).....	99
Figura 36 – Fixação do oxigênio (a); equipamentos de coleta e preservação de amostra (b); frascos contendo amostras para análises (c).	99
Figura 37 – Nível d'água observado nos pontos Q1 e Q3 de 11/06 a 03/08.....	100
Figura 38 – Vazão calculada por curva-chave nos pontos Q1 e Q3 de 11/06 a 03/08.	100
Figura 39 – Relações entre H1 e H3 e Q1 e Q3.	101
Figura 40 – NA nas proximidades do ponto Q2 onde se verifica a permanência a montante uma variação a jusante desse ponto.	102
Figura 41 – Seções transversais dos trechos Q1 a Q3 e Q3 a Q6.....	103
Figura 42 – $Q_{7,10}$ (a) e $Q_{95\%}$ (b) calculadas pelo aplicativo disponível no web site do SIGRH.	104

Figura 43 – Vazões médias mensais divididas pela média anual do Rio Itapanhaú e de lançamento do efluente tratado no período de novembro de 2006 a julho de 2008 extraídas a partir de dados diários.	104
Figura 44 – Esquema de segmentação do modelo com as extrações e lançamentos.	107
Figura 45 – Constantes harmônicas da estação Ilha Barnabé publicadas pela FEMAR com suas respectivas amplitudes e fases (http://www.femar.com.br). ...	109
Figura 46 – Níveis d’água observados e calculados no período de 01/01/08 a 31/03/08 no ponto Q3.	111
Figura 47 – Correlação entre os níveis d’água calculados e observados no período de 01/01/08 a 31/03/2008.	112
Figura 48 – Níveis d’água assumidos como condição de contorno de jusante no ponto Q6 obtidos a partir das novas amplitudes e fases das constantes harmônicas no ponto Q3.	113
Figura 49 – Resultados de NA relativos às diferentes vazões simuladas para os níveis d’água máximo e mínimo de jusante ao longo do trecho simulado.	114
Figura 50 – Resultados de profundidades relativas às diferentes vazões simuladas para os níveis d’água de jusante máximo e mínimo ao longo do trecho simulado.	115
Figura 51 – Resultados de velocidades relativas às diferentes vazões simuladas para os níveis d’água de jusante máximo e mínimo ao longo do trecho simulado.	115
Figura 52 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q1 (MA, MB e MM correspondem à maré alta, maré baixa e maré média, respectivamente). ..	117
Figura 53 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q2.....	118
Figura 54 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q3.....	119
Figura 55 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q4.....	120

Figura 56 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q5.....	121
Figura 57 – Resultado da calibração para o OD.	125
Figura 58 – Resultado da calibração para a DBO.....	125
Figura 59 – Resultado da calibração para o N-NH₃.	126
Figura 60 – Resultado da calibração para o NO₃.....	126
Figura 61 – Resultado da calibração para o P_{total}.....	127
Figura 62 – Resultado da calibração para a Clorofila-a.	127
Figura 63 – Resultado da calibração para o pH.....	128
Figura 64 - Gráficos da validação para período chuvoso (03/01/2007).....	129
Figura 65 - Gráficos da validação para período seco (30/5/2007).	130
Figura 66 – Resultados das saídas de OD para período chuvoso.....	133
Figura 67 – Resultados das saídas de DBO para período chuvoso.	133
Figura 68 – Resultados das saídas de NH₃ para período chuvoso.....	134
Figura 69 – Resultados das saídas de NO₃ para período chuvoso.....	134
Figura 70 – Resultados das saídas de P_{total} para período chuvoso.....	135
Figura 71 – Resultados das saídas de Clorofila-a para período chuvoso.....	135
Figura 72 – Resultados das saídas de pH para período chuvoso.....	136
Figura 73 – Resultados das saídas de OD para período seco.....	136
Figura 74 – Resultados das saídas de DBO para período seco.	137
Figura 75 – Resultados das saídas de NH₃ para período seco.	137
Figura 76 – Resultados das saídas de NO₃ para período seco.	138
Figura 77 – Resultados das saídas de P_{total} para período seco.....	138
Figura 78 – Resultados das saídas de Clorofila-a para período seco.	139

Figura 79 – Resultados das saídas de pH para período seco.	139
Figura 80 – Saídas do QUAL2Kw para aumento de 50% nas vazões de captação e lançamento do loteamento.	143
Figura 81 – Histograma de concentrações de OD no km 1,51 para maré alta no período chuvoso.	145
Figura 82 – Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_{ah}, K_{na} e K_{hp}.	146

RESUMO

Mendes, D. A. R. (2010). *Aplicação do modelo QUAL2Kw para avaliação de cargas pontuais no Rio Itapanhaú*. Dissertação de Mestrado. São Paulo: Escola Politécnica, Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária. Universidade de São Paulo. Orientadora: Dra. Monica Porto.

A existência de fontes pontuais em rios e córregos implica em impactos a jusante que podem comprometer os usos futuros desses recursos hídricos. Para tanto, a modelagem matemática apresenta-se como uma ferramenta fundamental na avaliação dessas descargas no sentido de avaliar o atendimento legal e subsidiar o licenciamento de atividades junto aos órgãos competentes. O principal objetivo do presente trabalho foi verificar, através de simulações numéricas com o modelo QUAL2Kw, a capacidade de assimilação de cargas pontuais em um trecho do Rio Itapanhaú para oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio, amônia, nitratos, fósforo total, clorofila-a e pH de acordo com as condições de maré, sempre considerando os limites estabelecidos pela Resolução CONAMA 357/05 para rios classe 2. Foi necessário realizar as simulações considerando o efeito da variação do nível d'água de jusante em função da proximidade com o oceano, uma vez que essas mudanças acarretam em alterações nas profundidades velocidades ao longo do curso d'água. A determinação da linha d'água foi realizada pelo aplicativo CLIV da Fundação Centro Tecnológica de Hidráulica da USP; as amplitudes e fases das harmônicas no trecho em estudo foram obtidas através do método dos mínimos quadrados e a partir das constantes harmônicas existentes na Ilha Barnabé, em Santos, SP. Foram obtidos resultados de calibração e validação razoáveis com o modelo QUAL2Kw, e as simulações foram divididas em período seco e chuvoso. No geral, o Rio Itapanhaú possui uma boa capacidade de assimilação das cargas hoje existentes, sendo que não houve nenhuma não conformidade em relação ao atendimento legal. A situação mais crítica ocorreu nos dois períodos hidrológicos na maré alta, onde as concentrações de fósforo total ficaram muito próximas ao limite de 100µg/L. Foi ainda realizada análise de incerteza para o oxigênio dissolvido e análise de sensibilidade pela Simulação Monte Carlo para o coeficiente de reaeração, taxa de nitrificação e taxa de hidrólise do fósforo orgânico. Realizou-se uma última simulação com aumento da carga em 50%, sendo que apenas o fósforo total e pH excederam os limites de padrão de qualidade de água.

Palavras – chave: recursos hídricos; modelos matemáticos; qualidade da água; QUAL2Kw

ABSTRACT

Mendes, D. A. R. (2010). *Application of the model QUAL2Kw for assessment of point sources at Itapanhaú River*. Dissertation of Master's degree. São Paulo: Escola Politécnica, Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária. Universidade de São Paulo. Guiding: Dra. Monica Porto.

The presence of point sources in rivers and streams implicates in downstream impacts that can commit their respective future uses. For this reason, the mathematical modeling comes as a fundamental tool in the evaluation of those discharges in sense to evaluate legal service and to subsidize the licensing of activities to the competent organs. The main objective of the present work was to verify, through numeric simulations with the model QUAL2Kw, the capacity of assimilation of point sources in a reach of Itapanhaú River for dissolved oxygen, biochemical oxygen demand, ammonia, nitrates, total phosphorus, chlorophyll-a and pH according with tide conditions, always considering the established limits for the Resolution CONAMA 357/05 for class 2 rivers. It was necessary to accomplish the simulations considering the effect of the variation of the downstream water level in function of the proximity with the ocean, once those changes cause alterations in depth and velocity along the channel. Water level determination was accomplished by application of CLIV, which was developed by Fundação Centro Tecnológico de Hidráulica of the Universidade de São Paulo; the amplitude and phases of the harmonics in study were obtained through the method of the minimum squares and from the existent harmonic constants in Ilha Barnabé, Santos, SP. It was obtained reasonable calibration and validation results with the model QUAL2Kw, and the simulations were divided in dry and rainy period. In general, Rio Itapanhaú possesses a good capacity of assimilation of the loads at present, and there was not any non conformity in relation to the legal aspects. The most critical situation happened in both hydrological seasons in the high tide, where the concentrations of total phosphorus were very close to the limit of 100µg/L. It was still accomplished uncertainty analysis for the dissolved oxygen and sensibility analysis for the reaeration coefficient, nitrification rate and hydrolysis rate of the organic phosphorus using Monte Carlo method. A last simulation was performed with increase of the load in 50%, and only total phosphorus and pH exceeded the water quality pattern limits.

Keywords: water resources; mathematical modeling; water quality; QUAL2Kw

1. INTRODUÇÃO

A água constitui parte integrante do organismo humano, representando uma considerável proporção da ordem de 70% de sua composição. Ademais, desempenha funções fisiológicas fundamentais, como dissolver e diluir todos os componentes solúveis que entram no organismo ou que permanecem como constituintes celulares; constituir veículo de elementos e compostos a serem excretados; regular a temperatura corporal pelo processo de absorção de calor de evaporação no processo contínuo de respiração. Nenhum outro solvente apresenta, reunidas às temperaturas e pressões normais na superfície de nosso planeta, as propriedades químicas, físicas e físico-químicas tão compatíveis com os processos biológicos essenciais que são reconhecidas na água (Braga *et al*, 2006).

Outra grande importância da água é como ambiente para a vida, uma vez que a maior parte dos seres vivos é aquática e na maior parte do tempo em escala geológica os seres terrestres inexistiam. A vida em contato com o ar seco só passou a ser viável quando alguns seres evoluíram pela seleção natural e conseguiram adaptações que consistiam no desenvolvimento de mecanismos de armazenagem e economia de água.

Dessa maneira, a água constitui elemento vital não só à natureza de um modo geral, como a todas as atividades desenvolvidas pelo Homem. Neste caso, além das necessidades ligadas aos processos biológicos, como alimento, matéria-prima e irrigação, a água é necessária à navegação, à geração de energia elétrica, à refrigeração de máquinas, aos processos industriais, à limpeza de ruas e ao transporte de dejetos e resíduos em geral.

Com os níveis atuais de desenvolvimento industrial e urbano, o impacto na qualidade da água passa a ser identificado uma vez que o uso do solo é fator de importância fundamental na ocorrência natural de água. O desmatamento e a urbanização podem modificar o ciclo hidrológico ao diminuírem, por exemplo, a evapotranspiração. Com o desmatamento, há maior presença da umidade no solo, e sua capacidade de infiltração também diminui. Assim, existe uma tendência de aumento do escoamento superficial durante eventos chuvosos, o que amplia a frequência de

ocorrência de cheias (Braga *et al*, 2006). Tais cheias tendem a lixiviar materiais poluentes presentes nos solos e dejetos até os rios e lagos, aumentando de maneira significativa o aporte de cargas a esses corpos d'água.

O lançamento de despejos domésticos e industriais também representa parcela significativa de contribuição poluidora em relação à água. Tais fontes são geralmente de fácil identificação e os impactos são identificados logo à jusante do seu lançamento.

A identificação das fontes e seus impactos na qualidade da água de uma bacia hidrográfica é um dos principais problemas no gerenciamento dos recursos hídricos, sendo a modelagem matemática uma ferramenta útil na avaliação dos seus efeitos.

Portanto, o uso de modelos matemáticos possibilita a avaliação do impacto referente ao uso da água, seja ele uma extração ou o lançamento de uma fonte pontual. É possível simular, situações futuras de uso da água e, então, definir melhor a sua capacidade de assimilação e limites para extração de maneira que haja um risco calculado em relação à deterioração da qualidade da água conforme os mecanismos legais.

Nesse contexto, o presente trabalho apresenta um estudo da capacidade de assimilação de fontes pontuais e extrações de água através de modelagem matemática para a situação atual e cenários futuros de um trecho do Rio Itapanhaú, no município de Bertoga, São Paulo.

O Rio Itapanhaú foi escolhido em função de ainda apresentar boa qualidade de água, inclusive atendendo a classe 2 da Resolução CONAMA 357/05 que está enquadrado. Dessa forma um maior conhecimento do trecho estudado pode fomentar a questão do uso racional dos recursos hídricos dessa bacia.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo geral

- Verificar, através de simulações numéricas com o modelo QUAL2Kw, a capacidade de assimilação de cargas pontuais no em um trecho do Rio Itapanhaú para oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio, amônia, nitratos, fósforo total, clorofila-a e pH de acordo com as condições de maré, sempre considerando os limites estabelecidos pela Resolução CONAMA 357/05 para rios classe 2.

2.2. Objetivos específicos

- Estimar a fase e a amplitude da maré no trecho de interesse através do método dos mínimos quadrados a partir das constantes harmônicas existentes na Ilha Barnabé, em Santos, SP;
- Determinar os coeficientes de descarga de algumas seções do trecho pesquisado em função da variação do nível de jusante em diversas sessões do Rio Itapanhaú utilizando o aplicativo CLIV;
- Definir qual situação é mais crítica à qualidade da água no trecho simulado do Rio Itapanhaú, considerando diferentes marés, vazões do Rio Itapanhaú e cargas de efluente lançadas;
- Calibrar e validar o modelo QUAL2Kw para o trecho do Rio Itapanhaú em estudo.
- A partir da situação mais crítica variar as vazões de lançamento e abstração no sentido de avaliar a resposta das variáveis de qualidade de água em questão no Rio Itapanhaú.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Aspectos legais referentes aos recursos hídricos na escala federal: a Resolução CONAMA 357/05

No Brasil, conforme a Lei Federal 9.433/97, o enquadramento dos corpos em classes é considerado um dos instrumentos da Política Nacional dos Recursos Hídricos e tal instrumento é implantado, a nível federal, pela Resolução CONAMA 357/05 e, no estado de São Paulo, pelo Decreto 8468/76.

A Resolução CONAMA 357/05 dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes, e dá outras providências. As águas doces, em particular, são distribuídas em cinco classes:

I - classe especial: águas destinadas:

- a) ao abastecimento para consumo humano, com desinfecção;
- b) à preservação do equilíbrio natural das comunidades aquáticas; e,
- c) à preservação dos ambientes aquáticos em unidades de conservação de proteção integral.

II - classe 1: águas que podem ser destinadas:

- a) ao abastecimento para consumo humano, após tratamento simplificado;
- b) à proteção das comunidades aquáticas;
- c) à recreação de contato primário, tais como natação, esqui aquático e mergulho, conforme Resolução CONAMA nº 274, de 2000;
- d) à irrigação de hortaliças que são consumidas cruas e de frutas que se desenvolvam rentes ao solo e que sejam ingeridas cruas sem remoção de película; e
- e) à proteção das comunidades aquáticas em Terras Indígenas.

III - classe 2: águas que podem ser destinadas:

- a) ao abastecimento para consumo humano, após tratamento convencional;
- b) à proteção das comunidades aquáticas;
- c) à recreação de contato primário, tais como natação, esqui aquático e mergulho, conforme Resolução CONAMA nº 274, de 2000;
- d) à irrigação de hortaliças, plantas frutíferas e de parques, jardins, campos de esporte e lazer, com os quais o público possa vir a ter contato direto; e
- e) à aquicultura e à atividade de pesca.

IV - classe 3: águas que podem ser destinadas:

- a) ao abastecimento para consumo humano, após tratamento convencional ou avançado;
- b) à irrigação de culturas arbóreas, cerealíferas e forrageiras;
- c) à pesca amadora;
- d) à recreação de contato secundário; e
- e) à dessedentação de animais.

V - classe 4: águas que podem ser destinadas:

- a) à navegação; e
- b) à harmonia paisagística.

Na Resolução CONAMA 357/05, também são fixados padrões de qualidade para cada classe, os quais permitem verificar o enquadramento dos corpos d'água. Os padrões de emissão são fixados para os efluentes líquidos de qualquer natureza. O enquadramento dos corpos d'água dar-se-á de acordo com as normas e procedimentos definidos pelo Conselho Nacional de Recursos Hídricos e Conselhos Estaduais de Recursos Hídricos.

O enquadramento é definido como o estabelecimento do nível de qualidade (classe) a ser alcançado e/ou mantido em um segmento de corpo d'água ao longo do tempo. O

fato de um trecho de rio estar enquadrado em determinada classe não significa, necessariamente, que esse seja o nível de qualidade que ele apresenta, mas sim aquele que se busca alcançar ou manter ao longo do tempo. Neste caso, a nova Resolução permite a criação de metas obrigatórias progressivas (intermediárias e final) para se atingir os padrões de qualidade. A participação dos Comitês de Bacia Hidrográfica é fundamental no processo de enquadramento, devendo escolher as variáveis representativas dos impactos. Entretanto, na ausência de metas ou para as demais variáveis não incluídas nas metas, vale o padrão de qualidade (Menegon, 2005).

3.2. Aspectos hidrológicos

A Hidrologia é a ciência que trata da água na Terra, sua ocorrência, circulação e distribuição, suas propriedades físicas e químicas, e sua reação com o meio ambiente, incluindo sua relação com as formas vivas (Chow, 1959).

Segundo Tucci *et al* (1993), a Hidrologia Aplicada está voltada para diferentes problemas que envolvem a utilização dos recursos hídricos, preservação do meio ambiente e ocupação da bacia.

Em relação à qualidade da água, a questão da disponibilidade hídrica é um fator de grande importância, uma vez que eventos de precipitação podem lixiviar materiais presentes nos solos de bacias ocupadas e com solos contaminados e, ao mesmo tempo, oferecer um volume maior para a diluição de fontes pontuais.

Torna-se, portanto, obrigatório o conhecimento do comportamento hidrológico de um rio de uma bacia ao se realizar estudos de dispersão de poluentes, sejam as fontes difusas ou pontuais. A Figura 1 apresenta o fluviograma do Rio Paraopeba, em Ponte Nova do Paraopeba, BA, onde é possível verificar a existência bem definida de dois períodos hidrológicos, um seco (maio a setembro) e outro chuvoso (outubro a abril).

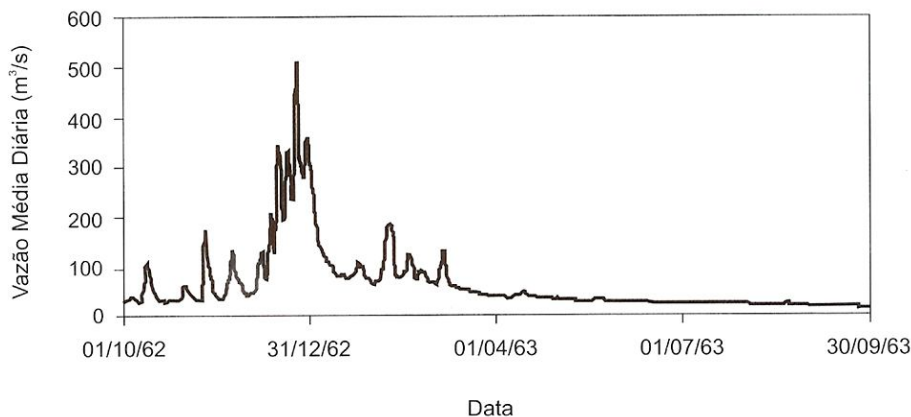


Figura 1 – Fluviograma do Rio Paraopeba em Ponte Nova do Paraopeba 1962/1963 (Fonte: Naghettini & Pinto, 2007).

A utilização de modelos de qualidade pode ser feita com vazões de referência, que geralmente são vazões observadas em um determinado período, vazão média (média anual, média anual do período chuvoso, média do período seco) e vazões mínimas.

Segundo von Sperling (2007), a vazão observada em um determinado período é utilizada quando se deseja calibrar o modelo, ou seja, ajustar os coeficientes do modelo, para que os dados simulados sejam os mais próximos possíveis dos dados observados (medidos) no curso d'água no período em análise.

A vazão mínima é utilizada para o planejamento dos recursos hídricos da bacia hidrográfica, para a avaliação do atendimento aos padrões ambientais do corpo receptor, para a alocação de cargas poluidoras e para a concessão de outorgas de captação e de lançamento. A determinação das eficiências requeridas para os tratamentos dos esgotos nos diversos lançamentos deve ser determinada em condições críticas. Essas condições críticas no corpo receptor comumente refletem períodos de estiagem e ocorrem exatamente no período de vazão mínima, em que a capacidade de diluição do rio é menor (von Sperling, 2007).

As vazões mínimas de referência são valores estimados por métodos estatísticos levando em conta probabilidades de ocorrência (CETESB, 2006). As vazões mínimas mais utilizadas são a $Q_{7,10}$ e a Q_{95} .

A vazão $Q_{7,10}$ tem sido utilizada em diversas legislações ambientais de proteção da qualidade de corpos d'água, bem como em estudos de abastecimento de água e outorga pelo uso da água.

Tal vazão pode ser entendida como o valor anual da menor média de 7 vazões diárias consecutivas que pode se repetir, em média, uma vazão a cada 10 anos, para períodos de retorno de 10 anos. Assim, em cada ano da série histórica, procede-se à análise das 365 médias diárias de vazão. Seleciona-se, em cada ano, o período de 7 dias consecutivos que resulta na menor média de 7 valores. Este é um conceito de média móvel, pois a média é calculada para 7 termos, mas vai se movendo (dias 1 a 7; 2 a 8; 3 a 9 etc.). Com os valores da menor média de 7 dias de cada ano procede-se a uma análise estatística, que permite interpolar ou extrapolar o valor para o período de retorno de 10 anos.

A razão de se ter, em cada ano, a menor média de 7 dias consecutivos, e não o menor valor absoluto da vazão, visa não tornar o critério excessivamente restritivo, baseando-se em um único e menor valor de vazão. Desta forma, usa-se o conceito de média móvel, que suaviza as séries históricas. Em cursos d'água intermitentes, a vazão $Q_{7,10}$ é igual à zero, pelo fato de prevalecerem, no período de seca de cada ano, vazões nulas na calha do rio (von Sperling, 2007).

Após a determinação da menor média de 7 dias consecutivos de cada ano, parte-se para a análise de frequência e para a determinação da vazão para o período de retorno desejado. Para tanto, são utilizados os seguintes conceitos:

- T_r : tempo de retorno (anos), ou seja, o número médio de anos para que ocorra um vazão igual ou inferior à vazão considerada uma vez em um ano qualquer;
- p : probabilidade da ocorrência de uma vazão igual ou inferior àquela considerada, em um ano qualquer;
- N : número de anos com dados disponibilizados para a análise;
- m : número de ordem da vazão, após ela ter sido ordenada de forma crescente ($m = 1$ para menor vazão e $m = N$ para maior vazão);

- vazão: vazão mínima de cada ano, determinada segundo algum critério (vazão mínima anual, vazão mínima de 7 dias consecutivos, vazão mínima de 30 dias consecutivos etc.).

A probabilidade acumulada de ocorrência de uma vazão igual ou inferior à considerada, denotada por p , e o tempo de retorno T_r , são inter-relacionados por meio das expressões:

$$p = \frac{m}{N+1} \quad \text{Equação (1)}$$

$$T_r = \frac{1}{p} \quad \text{Equação (2)}$$

ou:

$$T_r = \frac{N+1}{m} \quad \text{Equação (3)}$$

Para se determinar a vazão associada a um período de retorno qualquer (por exemplo 10 anos), deve-se lançar a distribuição dos valores em um gráfico de probabilidade. Para tanto, deve-se assumir uma distribuição de probabilidades para os dados de vazão analisados. Distribuições que têm sido utilizadas para este fim são as de Weibull, Gumbel, log-normal e Log-Pearson tipo III. Em geral considera-se que as distribuições de vazões são limitadas por um valor mínimo (vazão nula) e costumam não se distribuir de forma simétrica, como a distribuição normal. Tempos de retorno relativamente curtos, que não excedam grandemente o período dos registros fluviométricos, têm sido suficientes para os estudos de vazão de estiagem. As estimativas para tempos de retorno mais elevados dependerão, no entanto, do comportamento da cauda inferior da distribuição ajustada (von Sperling, 2007).

A vazão Q_{95} provém da curva de permanência, que é aquela que apresenta a frequência com que ocorrem valores iguais ou superiores ao de uma série temporal. Com essa informação é possível ter garantia de que se poderá contar com vazões iguais ou maiores do que a demanda que se deseja suprir. Um valor com garantia de 95% significa que a seção fluvial permanece com vazões acima dele em 95% do tempo (Tucci *et al* 1993). Para o traçado da curva de permanência que fornecerá esse valor pode-se aplicar o seguinte procedimento:

- i. Ordenar a variável temporal em ordem decrescente, atribuindo a ordem 1 ao maior valor e ordem n ao menor, em uma amostra com tamanho n;
- ii. Computar a frequência com que cada valor ordenado é excedido ou igualado (permanência), como $100 \cdot (m/n)$, sendo m sua ordem e n o tamanho da amostra;
- iii. Lançar num gráfico a série ordenada com a escala de permanência representada no eixo horizontal.

A Figura 2 apresenta uma curva de permanência das vazões médias diárias para o Rio Paraopeba em Ponte Nova do Paraopeba, BA.

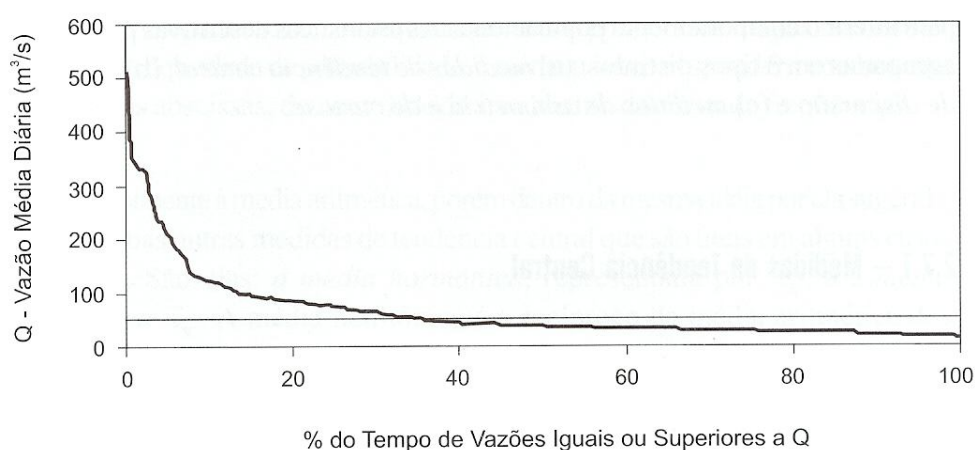


Figura 2 – Curva de permanência das vazões do Rio Paraopeba em Ponte Nova do Paraopeba (Fonte: Naghettini & Pinto, 2007).

Pela forma da curva de permanência podem ser feitas inferências sobre as características da bacia hidrográfica e o correspondente regime hidrológico. Na Figura 3, um dos rios drena uma bacia permeável, recebendo alimentação do lençol freático. A pequena variabilidade das vazões é refletida em uma curva de permanência mais plana. Por outro lado, tem-se também um rio que drena uma bacia mais impermeável, com um rápido regime de escoamento, uma grande variabilidade das vazões diárias e, em decorrência, uma curva de permanência com maior inclinação. Finalmente, o terceiro rio é intermitente, e na maior parte do tempo não há vazão escoando pela calha, e as vazões de referência Q_{95} , Q_{90} e mesmo Q_{50} são iguais à zero.

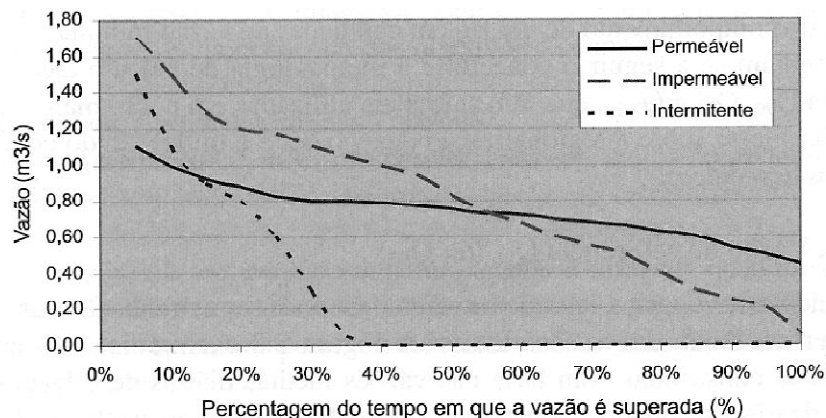


Figura 3 – Exemplificação de três curvas de permanência construídas com base nas vazões médias diárias de estações fluviométricas de três rios distintos (Fonte: von Sperling, 2007).

Usualmente a vazão $Q_{7,10}$ é mais restritiva que as vazões $Q_{95\%}$. O conceito de vazão de permanência tem sido utilizado por alguns órgãos ambientais como vazão de referência em estudos de avaliação de impacto ambiental e atendimento à legislação. Ele é mais fácil de ser determinado e melhor compreendido que a $Q_{7,10}$. Algumas agências utilizam o conceito de $Q_{90\%}$, ao passo que outras utilizam o conceito mais restritivo de $Q_{95\%}$ (von Sperling, 2007). Segundo CETESB (2006), os estudos estatísticos de dados de vazões só podem ser aplicados em casos que:

- I. As séries históricas forem suficientemente extensas para representarem períodos hidrológicos significativos e diminuir o risco ao adotarem-se séries mais longas;
- II. As vazões forem absolutamente naturais. No caso de aproveitamentos com reservação ou retiradas/lançamentos significativos a montante da seção não há sentido em se procederem a estudos estatísticos às séries existentes.

Conforme é definido na Resolução CONAMA 357/05, “vazão de referência é a vazão do corpo hídrico utilizada como base para o processo de gestão, tendo em vista o uso múltiplo das águas e a necessária articulação das instâncias do Sistema Nacional de Meio Ambiente - SISNAMA e do Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos - SINGRH”.

3.3. Comportamento dos poluentes em rios

Os poluentes, ao atingirem os corpos d'água, sofrem a ação de diversos mecanismos físicos, químicos e biológicos existentes na natureza, alterando seu comportamento e suas respectivas concentrações.

Dentre os principais mecanismos físicos pode-se destacar a diluição (resultante do processo de mistura do despejo com a água presente no corpo d'água), a ação hidrodinâmica (difusão molecular e turbulenta), gravidade, luz e temperatura (Braga *et al*, 2005).

Nos rios o escoamento ocorre com maior velocidade em uma superfície livre mais turbulenta e tende a apresentar uma interface ar-água com maior área superficial. Como a taxa de troca de gases nessa interface é proporcional à área da superfície, a turbulência aumenta a intensidade com a qual essas trocas ocorrem. Conseqüentemente, o oxigênio atmosférico penetra mais rapidamente no meio aquático, e os gases resultantes da decomposição anaeróbica podem deixar o meio aquático com a mesma rapidez.

A ação da gravidade pode alterar a qualidade da água por meio da sedimentação de material particulado em suspensão que são mais densos que o meio aquático. Tal fenômeno pode ser modelado pela lei de Stokes:

$$v_s = \alpha \frac{g}{18} \left(\frac{\rho_s - \rho_w}{\mu} \right) d^2 \quad \text{Equação (4)}$$

Onde:

v_s : a velocidade de sedimentação (cm/s)

α : fator de forma adimensional em função do formato das partículas

g : aceleração da gravidade (cm/s²)

ρ_s e ρ_w : as densidades da partícula e da água, respectivamente (g/cm³)

μ : viscosidade dinâmica (g/cm.s)

d : diâmetro efetivo da partícula (cm)

Na prática poucos modelos de qualidade de água utilizam lei de Stokes, uma vez que partículas vivas como o fitoplâncton podem flutuar devido ao vacúolo interno (Chapra, 1997).

No meio aquático a presença de luz é condição necessária para a existência de algas, que são a fonte básica de alimento. Além disso, elas são responsáveis pela produção endógena de oxigênio. A luz extingue-se gradativamente na água em função da profundidade, limitando a ocorrência da fotossíntese apenas à camada superficial. Assim há um aumento da turbidez e diminuição da transparência e, portanto, da penetração de luz. Adicionalmente, a temperatura da água altera a solubilidade dos gases e a cinética das reações químicas, fazendo com que a interação dos poluentes com o ecossistema aquático seja bastante influenciada por sua variação.

Um corpo d'água poluído por lançamentos de matéria orgânica biodegradável sofre um processo natural de recuperação denominado autodepuração. A autodepuração realiza-se por meio de processos físicos (diluição, sedimentação), químicos (oxidação) e biológicos. A decomposição da matéria orgânica corresponde, portanto, a um processo biológico integrante do fenômeno da autodepuração. É importante salientar que os compostos orgânicos biorresistentes e os compostos inorgânicos (incluindo os metais pesados) não são afetados pelo mecanismo da autodepuração.

Ademais, segundo von Sperling (1996), o ecossistema de um corpo d'água antes do lançamento de despejos encontra-se usualmente em estado de equilíbrio, após a entrada da fonte de poluição, o equilíbrio entre as comunidades é afetado e, resultando em uma desorganização inicial seguida por uma tendência posterior à reorganização. Nesse sentido a autodepuração pode ser estendida como um fenômeno de sucessão ecológica, onde o restabelecimento do equilíbrio no meio aquático é feito por mecanismos essencialmente naturais, havendo uma sequência sistemática de substituições de uma comunidade por outra, até que a comunidade estável se estabeleça em equilíbrio com as condições locais.

Por ser a autodepuração um processo que se desenvolve ao longo do tempo e considerando-se a dimensão do curso d'água receptor como predominantemente

longitudinal, tem-se que os estágios da sucessão ecológica podem ser associados a zonas fisicamente identificáveis no rio.

Após a ação dos decompositores, diz-se que a matéria orgânica foi estabilizada ou mineralizada, por não existirem mais compostos orgânicos biodegradáveis, mas apenas água, gás carbônico e sais minerais. Apenas quando cessa a decomposição e os decompositores morrem é que o oxigênio começa a “sobrar”, e sua concentração aumenta novamente. Essas duas etapas ocorrem simultaneamente ao longo de todo o processo. No trecho afetado do rio, ocorrerão alterações das espécies presentes, da cor, turbidez e outras características da água (Braga *et al*, 2005).

Na Figura 4, é possível observar as seguintes regiões características:

- Região anterior ao lançamento de matéria orgânica: em geral é uma região de águas limpas, com elevada concentração de oxigênio dissolvido e vida aquática superior, isso se já não existir poluição anterior;
- Zona de degradação: localiza-se a jusante do ponto de lançamento do poluente biodegradável, sendo caracterizada por uma diminuição inicial na concentração de oxigênio dissolvido, sedimentação de parte do material sólido e aspecto indesejável. Nessa região, ainda existem peixes que afluem ao local em busca de alimentos, quantidade elevada de bactérias e fungos, mas poucas algas;
- Zona de decomposição ativa: é a zona em torno da qual a concentração de oxigênio dissolvido atinge o valor mínimo, podendo inclusive tornar-se igual à zero em alguns casos. Nessa região, a quantidade de bactérias e fungos diminui, havendo também uma redução ou mesmo eliminação da quantidade de organismos aeróbios;
- Zona de recuperação: nessa zona, ocorre o aumento na concentração de oxigênio dissolvido, pois os mecanismos de reaeração acabam predominando sobre os mecanismos de desoxidação. O aspecto das águas melhora continuamente, havendo uma redução na quantidade de bactérias e fungos e um aumento na quantidade de peixes e outros organismos aeróbios. Existe

uma tendência para a proliferação de algas em consequência da disponibilidade de nutrientes, resultantes da decomposição da matéria orgânica; e

- Zona de águas limpas: é a zona na qual volta a apresentar condições satisfatórias com relação às concentrações de oxigênio dissolvido e DBO e com relação à presença de organismos aeróbios. Todavia, isso não significa necessariamente que ela esteja livre de organismos patogênicos.

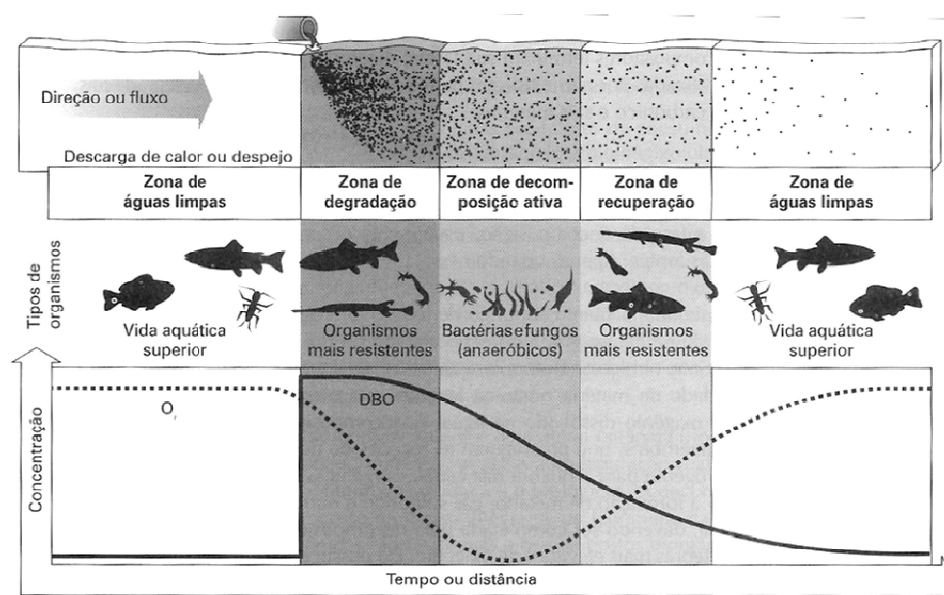


Figura 4 – Processo de autodepuração. Fonte: Braga *et al* (2005).

3.4. Modelos de simulação de qualidade de água

A modelagem da qualidade da água pode ser um instrumento para o êxito no desenvolvimento de projetos na bacia hidrográfica. A aplicação dos modelos é viável para avaliar bacias estratégicas, desenvolver metas e objetivos, definir soluções e, desenvolver planos de gestão. No contexto do plano da bacia, os modelos tornam-se necessários para identificar os agentes interferentes e suas relações, avaliando a eficiência das práticas adotadas ou determinar as respostas nas águas após o lançamento de cargas poluidoras. Em alguns casos, as ferramentas de modelagem não estão disponíveis ou aplicáveis para se estimar a variedade desses poluentes em ambientes mais complexos presentes no sistema da bacia (EPA, 1997).

Muitos dos modelos de qualidade de água em uso, atualmente, são extensões de duas equações bastante simples propostas por Streeter e Phelps em 1925 para predizerem a demanda bioquímica de oxigênio (DBO) de vários constituintes biodegradáveis e a concentração resultante de oxigênio dissolvido (OD) nos rios (Thomann, 1972).

Historicamente, a modelagem da qualidade da água evoluiu de forma significativa desde o seu surgimento no início do século XX. Tal evolução pode ser dividida em quatro fases, que podem ser relacionadas de acordo com os interesses da sociedade e da capacidade dos computadores que eram disponíveis durante cada um dos períodos (EPA, 1997).

A primeira fase foi onde o foco da modelagem era a alocação de cargas urbanas, onde se desenvolveu o trabalho original de Streeter e Phelps na modelagem do Rio Ohio. Esse trabalho e os subsequentes procuraram avaliar os níveis de oxigênio dissolvido em rios e estuários, além do desenvolvimento inicial de modelos de simulação de bactérias.

Em função da indisponibilidade de computadores, as soluções dos modelos eram limitadas a assumirem cinéticas lineares, geometrias simples e regimes permanentes de escoamento. Portanto, o escopo dos problemas que podiam ser tratados era restringido pelas ferramentas computacionais daquela época (Chapra, 1997).

Na década de 60 os computadores digitais tornaram-se extensamente disponíveis. Tal fato implicou em maiores avanços nos modelos e nas maneiras que estes poderiam ser aplicados. Os primeiros avanços em modelagem envolveram expressões numéricas de estruturas analíticas. O oxigênio ainda era o foco, mas os computadores permitiam os pesquisadores a tratarem de sistemas com geometrias e cinéticas mais complexas, além de simulações não permanentes. Os modelos foram ainda estendidos para sistemas bidimensionais, como estuários e baías.

A mesma década também trouxe mudanças nas maneiras nas quais os modelos eram aplicados, onde passaram a focar a bacia hidrográfica como um sistema e não mais somente os efeitos locais de fontes pontuais simples. Embora a abordagem

principal ainda fosse sobre tais cargas, os computadores permitiram uma perspectiva mais holística a ser adotada.

Na década de 70, outras mudanças ocorreram: as preocupações da sociedade mudaram para além do oxigênio dissolvido e fontes urbanas pontuais para uma maior preocupação para com o meio ambiente, quando houve o nascimento do movimento ambientalista.

O principal problema de qualidade de água discutido nesse período era a eutrofização (crescimento excessivo das plantas aquáticas, tanto planctônicas quanto aderidas, em níveis tais que sejam considerados como causadores de interferências com os usos desejáveis dos corpos d'água, Thomann, 1987). Como consequência, os cientistas ampliaram e incluíram mecanismos de representação dos processos biológicos, tirando proveito das pesquisas em oceanografia, onde fora possível o desenvolvimento de modelos de cadeia alimentar e de nutrientes. Em função da existência dos computadores, cinéticas não lineares puderam ser implantadas nas estruturas dos modelos (Chapra, 1997).

Deve ser notado que nesse período a maior preocupação era controlar o problema das fontes pontuais. De fato, a maioria das cidades norte-americanas instalou estações de tratamento de esgotos com grau secundário. Apesar da melhora dos níveis de oxigênio dissolvido em vários locais, para áreas onde o controle de fontes pontuais era insuficiente, as atenções sobre as cargas difusas também aumentavam.

Em um primeiro momento nos países desenvolvidos a preocupação deveria ter conduzido à implantação do processo de gestão da qualidade da água. Tal fato não ocorreu por três razões básicas. Primeiramente, em função de que a eutrofização é um problema sazonal e, portanto, muito mais dinâmico em relação ao controle de cargas pontuais urbanas. Os modelos poderiam ser atualizados e passar a considerar os problemas dinâmicos, porém, ao inserir tal característica, passa-se a exigir maiores recursos computacionais em relação ao problema de cargas pontuais, que é permanente e linear. Em segundo lugar, o movimento ambientalista fomentava um cenário de emergência a respeito da "poluição zero". Uma mentalidade de remediação

“a qualquer custo” conduziu a conceitos como “descarga zero” como meta nacional nos EUA. Em terceiro lugar, a economia de tais países passava por um crescimento súbito e, portanto, a exequibilidade econômica dessa estratégia não fora seriamente questionada. Como consequência, a ideia de avaliar o custo benefício foi tímida e durante tal período de progresso as metas extremamente restritivas e imaginárias nunca foram atingidas (Chapra, 1997).

O maior avanço dos modelos, neste período, foi reconhecer o notável papel dos sólidos suspensos no transporte e destino dos tóxicos. A associação dos tóxicos com as partículas em suspensão representa o principal mecanismo de controle dessa classe de substâncias por meio de seu transporte e destino nas águas naturais. Além do mais, pequenas partículas orgânicas, tais como fitoplâncton e detritos, podem ser ingeridas e transportadas para organismos superiores (Thomann, 1987). Assim, tais interações, provenientes da cadeia alimentar, fizeram com que os modeladores passassem a enxergar o ciclo natural do carbono orgânico mais do que um fim em si próprio. A cadeia alimentar é vista como uma transportadora e concentradora de contaminantes.

Thomann (1998) afirma que a evolução dos modelos de qualidade de água é vista em três estágios: o primeiro, de 1925 o início da de 80, apenas as fontes pontuais eram consideradas entradas sendo as fontes não pontuais e sedimentos associados a cargas externas; a segunda, até meados da década de 90, a modelagem do sedimento foi acoplada à coluna d'água e modelos hidrodinâmicos e de cargas difusas foram interligados; a terceira, até a publicação do seu trabalho, engloba modelos atmosféricos com a possibilidade de se incluir aspectos do ecossistema aquático.

Atualmente, uma nova mudança vem ocorrendo com o desenvolvimento e aplicação dos modelos matemáticos de qualidade de água. Existe uma corrente crescente que reconhece a proteção ambiental como fator decisivo para a manutenção da qualidade de vida. No entanto, poder-se-ia adicionar a essa preocupação outros quatro fatores (Chapra, 1997):

- I. Devido à pressão econômica, existem incentivos para soluções com custo efetivo. Hoje, melhores modelos são necessários para evitar severos custos causados por decisões imperfeitas.
- II. Os países em desenvolvimento reconhecem que o crescimento econômico deve estar atrelado à proteção ambiental. Assim, as estratégias de controle exigem medidas de custo efetivo, que devem estar embasadas em modelos confiáveis.
- III. O hardware e o software experimentaram uma revolução ao longo da última década, de forma que interfaces gráficas e sistemas de suporte a decisão têm sido desenvolvidos para facilitarem a geração e visualização das saídas dos modelos.
- IV. Pesquisas recentes nos campos da interação água-sedimento e da caracterização hidrodinâmica têm promovido avanços que podem ser facilmente assimilados pela estruturação dos novos modelos matemáticos de qualidade de água.

Chapra (1997) também define três eras de percepção dos problemas de poluição. Estas se iniciam com a poluição patogênica, seguida pela poluição bioquímica, propriamente dita e a poluição química.

A poluição patogênica é aquela resultante das descargas nos cursos d'água de esgotos, em grande parte não tratados, de fezes de animais e de lixo doméstico, sendo a principal preocupação nos primeiros estágios de desenvolvimento das bacias hidrográficas.

A poluição bioquímica, caracterizada por níveis elevados de DBO e de sólidos suspensos (SS), acompanhou o processo de industrialização em que se submeteram as bacias, observando-se, ao mesmo tempo, elevações nas concentrações de fósforo, cuja elevação foi motivo de preocupação para especialistas da área ambiental.

A era da poluição química decorre, quando se verifica um decréscimo da preocupação com as variáveis macroscópicas, tais como a DBO e os SS, de um constante interesse por poluentes específicos, em especial, os micropoluentes. Pode-

se, por exemplo, traçar uma sucessão dos problemas de poluição, refletidos na literatura de modelagem de qualidade d'água, da seguinte forma:

- poluição por compostos orgânicos facilmente degradáveis (modelos de OD e DBO);
- poluição causada por descargas de fontes localizadas, evoluindo para descargas de fontes não pontuais e eutrofização (modelos ecológicos - ciclo de nutrientes) e
- poluição de tóxicos (modelos de cadeia alimentar - ecológicos).

A Figura 5 ilustra os diferentes níveis de esforços historicamente destinados às atividades de pesquisa, para cada uma das categorias relacionadas.

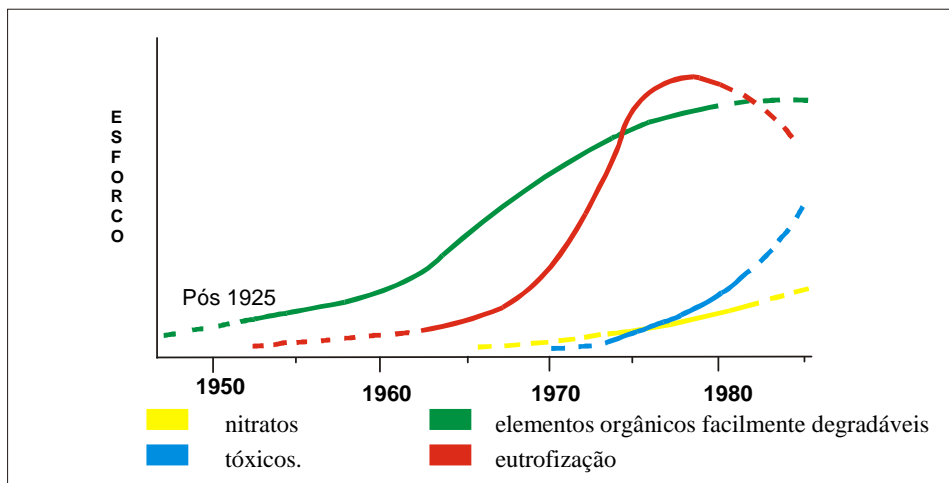


Figura 5 – Cenário aproximado do nível de esforço de pesquisa aplicado ao desenvolvimento de modelos associados a problemas de qualidade – Fonte: Martins (1988).

A evolução dos diversos modelos de qualidade já indicados, segundo seus principais parâmetros e processos a serem simulados, a partir do equacionamento proposto por Streeter e Phelps, é ilustrada na Figura 6.

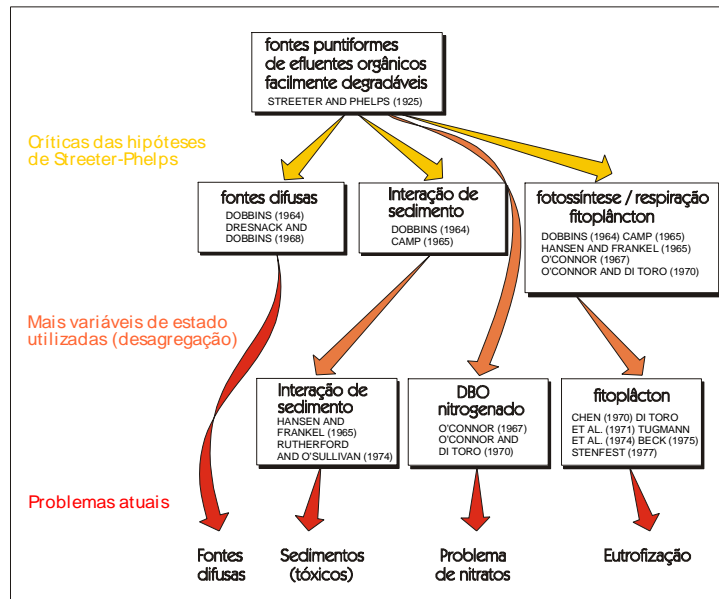


Figura 6 – Desenvolvimento em duas fases do trabalho original de Streeter e Phelps – Fonte: Martins (1988).

Existem várias maneiras pelas quais um sistema pode atingir os objetivos para os quais foi planejado. Embora nem todas as alternativas sejam igualmente atraentes, um dos aspectos é identificar a solução de mínimo custo. Isto leva a um conflito entre o número de soluções alternativas que devem ser analisadas e o nível de detalhe que deve ser incluído em cada análise.

Neste contexto, o aspecto de qualidade não é exceção dentro de um sistema de recursos hídricos, sobretudo se o número de alternativas forem muitas e os processos envolvidos, complexos.

Desta forma, não existe um único modelo, capaz de satisfazer às necessidades do usuário, assim propõem-se uma hierarquia de determinados tipos específicos de modelos para diferentes fins, como forma de propiciar a análise de um grande número de alternativas, sem necessariamente sacrificar a qualidade da análise. Assim, para cada situação específica, o modelo e os dados pertinentes dependem dos propósitos do estudo.

Modelos regionais de planejamento de qualidade d'água de longo termo não requerem detalhes minuciosos. Entretanto, uma importante decisão que deve ser tomada no início do processo de planejamento, é a escolha do tipo de modelagem apropriada ao caso, pois este deve ser capaz de ser desenvolvido, calibrado, validado e executado dentro dos recursos e do tempo disponíveis (Menegon, 2005).

3.4.1. Cargas e cinética das reações

A carga de um poluente é determinada pelo produto da sua vazão pela sua concentração, ou seja:

$$W = Q * c \quad \text{Equação (5)}$$

Onde Q é a vazão [L³/T], c é a concentração do poluente [M/L³] e W é a carga do poluente [M/T]. A unidade mais usual para expressar a concentração é a mg/L, sendo que 1mg/L corresponde a 1ppm (partes por milhão), considerando que a densidade da água seja de 1g/cm³.

De acordo com Chapra (1997), as definições dos conceitos de concentração e de carga são essenciais para a aplicação de modelos de qualidade de água. A quantidade do poluente num sistema é representada por sua massa num determinado volume de água, que é a concentração. A utilidade da concentração reside no fato de que a mesma representa melhor a intensidade de poluição.

Uma vez lançado em um corpo d'água, uma variedade de situações podem ocorrer: esse poluente pode ser carregado e disperso pelas correntes para fora do sistema analisado; pode sair do sistema por volatilização, sedimentação ou por transporte pelo volume de água que sai do sistema. Todos esses mecanismos afetam o poluente sem afetar a sua composição química, porém o poluente pode ser transformado por reações químicas e bioquímicas (Chapra, 1997).

Como exemplo, quando a matéria orgânica do esgoto doméstico (representada pela glicose na Equação (6)) é oxidada por bactérias via respiração a gás carbônico e água tem-se uma reação irreversível conhecida como decomposição:



As reações irreversíveis como a da Equação 6 são aquelas que se completam, levando a uma total transformação dos reagentes em produtos. Elas se processam num único sentido e se perpetuam até a extinção de um dos reagentes. Reações reversíveis podem ocorrer nos dois sentidos, dependendo da concentração dos reagentes ou produtos (Chapra, 1997).

A identificação das leis que regem as variações das concentrações das várias espécies químicas em função do tempo é particularmente importante nos sistemas onde ocorrem reações lentas. A cinética química é o estudo da velocidade das reações e no campo do saneamento básico e ambiental são várias as aplicações da cinética nos estudos sobre o tratamento de águas para abastecimento: cinética da floculação, cinética da redução do índice de coliformes através da cloração; nos estudos sobre o tratamento de esgotos: cinética da biodegradação de esgotos sanitários e de efluentes industriais, cinética da remoção de outros poluentes; nos estudos de controle da poluição das águas naturais: cinética de remoção de DBO e de outros constituintes (Menegon, 2005).

A cinética ou taxas dessas reações podem ser expressas quantitativamente pela lei de ação das massas, que define que a taxa é proporcional à concentração dos reagentes. Essa taxa pode ser representada genericamente por:

$$\frac{dc_A}{dt} = -kf(c_A, c_B, \dots) \quad \text{Equação (7)}$$

Essa relação é denominada lei das taxas, que especifica que a taxa de uma reação é dependente do produto de uma constante k dependente da temperatura e uma função das concentrações dos reagentes (Chapra, 1997).

A relação funcional $f(c_A, c_B, \dots)$ é quase sempre determinada experimentalmente. Uma forma geral da Equação 7 é:

$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_A^\alpha c_B^\beta \quad \text{Equação (8)}$$

Os expoentes das concentrações definem a ordem da reação. Na Equação 8 a reação tem ordem α em relação ao reagente A e ordem β em relação ao reagente B. A ordem geral da reação é:

$$n = \alpha + \beta \quad \text{Equação (9)}$$

A ordem geral de uma reação, ou a ordem em relação a um dos reagentes não necessariamente é um número inteiro (Chapra, 1997). Entretanto, a maioria das reações mais importantes usadas em modelagem de qualidade da água possui ordens de números inteiros (0, 1 e 2). Geralmente as reações são estudadas em relação a um reagente e a Equação 9 fica:

$$\frac{dc}{dt} = -kc^n \quad \text{Equação (10)}$$

A Tabela 1 apresenta a resolução da equação 10 para diferentes ordens de reação ao se considerar $c=c_0$ em $t=0$.

Tabela 1 - Resolução da equação 10 para diferentes ordens de reação ao se considerar $c=c_0$ em $t=0$.

Ordem	C
0	$c_0 - kt$
1	$c_0 e^{-kt}$
2	$c_0 \frac{1}{[1 + (n-1)kc_0^{n-1}t]^{\frac{1}{n-1}}}$

A determinação das constantes k e n constitui-se em problema prático muito importante na interpretação das transformações lentas que ocorrem nas águas naturais, como por exemplo, a decomposição biológica dos compostos orgânicos. Obtidas as constantes da reação, o fenômeno encontra-se equacionado, podendo-se obter os valores das concentrações residuais após qualquer intervalo de tempo (Menegon, 2005). Como exemplo de reações de primeira ordem tem-se a DBO e os coliformes (von Sperling, 2005).

3.4.2. Modelo de Streeter-Phelps

Uma das primeiras formulações matemáticas propostas na área de qualidade da água foi a da previsão do déficit de oxigênio dissolvido no caso de poluição por matéria

orgânica biodegradável, proposta por Streeter e Phelps (1925). Tal formulação passou a ser conhecida como Modelo de Streeter – Phelps.

A hipótese básica no modelo de Streeter – Phelps é que o processo de decomposição da matéria orgânica no meio aquático segue uma reação de primeira ordem, semelhante àquela dos processos radioativos. Nesse tipo de reação, a taxa de redução da matéria orgânica é proporcional à concentração de matéria orgânica presente em um dado instante de tempo. Assim, pode-se escrever:

$$\frac{dL}{dt} = -K_1 \cdot L \quad \text{Equação (11)}$$

onde L é a demanda bioquímica de oxigênio e K, é a constante de desoxigenação que depende do tipo de efluente. O sinal negativo que haverá uma redução da concentração de DBO com o passar do tempo. A integração da equação diferencial de primeira ordem dada por (11) resulta em:

$$L_1 = L_0 \cdot e^{-K_1 \cdot t} \quad \text{Equação (12)}$$

onde L_0 é a DBO imediatamente após o ponto de lançamento, ou seja, a quantidade total de oxigênio necessária para a completa estabilização da matéria orgânica em termos de sua componente de carbono. Como o carbono é um macronutriente que comparece em grandes proporções na matéria orgânica, essa aproximação é razoável em termos práticos. Um conceito importante associado é o de DBO satisfeita em t dias (DBO_t), dado por:

$$DBO_t = L_0 \cdot (1 - e^{-K_1 \cdot t}) \quad \text{Equação (13)}$$

ou seja, DBO_t é a quantidade de oxigênio dissolvido consumido desde o instante inicial até o instante t. Os ensaios de qualidade de água em laboratório utilizam a DBO_5 para informar sobre o potencial de poluição com base em amostras de água. A DBO_5 dos esgotos domésticos situa-se na faixa de 300 mg/L a 500 mg/L (Metcalf & Eddy, 2003, Jordão & Pessôa, 2005).

A reação de DBO que provoca um consumo de OD do meio líquido ocorre ao mesmo tempo em que a reação de reoxigenação do meio líquido, na qual, por meio de

processos exógenos, o oxigênio passa da atmosfera para a água. Essa transferência ocorre por uma reação de difusão em que a taxa de transferência depende da concentração relativa do oxigênio no ar e na água. Essa dinâmica também é modelada por uma reação de primeira ordem dada por:

$$\frac{dL}{dt} = -K_2 \cdot D \quad \text{Equação (14)}$$

onde D é o “déficit” de oxigênio, isto é, a diferença entre a concentração de saturação do oxigênio no meio líquido e a concentração de oxigênio dissolvido na água em um dado instante, e K_2 é constante de reoxigenação do corpo de água, que depende da turbulência do meio. O valor de K_2 pode ser estimado pela fórmula de O’Connor e Dobbins:

$$K_2 = 3,93 \frac{U^{\frac{1}{3}}}{H^{\frac{2}{3}}} \quad \text{Equação (15)}$$

onde U é a velocidade média do escoamento em m/s e H é a profundidade em metros. A fórmula de O’Connor e Dobbins é válida para valores de velocidade entre 0,15 m/s e 0,50 m/s e para valores de profundidade do rio entre 0,30 m e 0,90 m. Existem outras fórmulas para diferentes intervalos de aplicação (Chapra, 1997).

Tendo em conta que (12) e (15) ocorrem ao mesmo tempo, sendo (12) responsável pela redução de OD e (15) pelo aumento de OD (ou redução do déficit D), é possível combinar as duas equações para representar a variação do déficit de oxigênio com o tempo, o que resulta em:

$$\frac{dL}{dt} = K_1 \cdot L - K_2 \cdot D \quad \text{Equação (16)}$$

O sinal positivo para a parcela $K_1 \cdot L$ indica que ela contribui para o aumento do déficit. O resultado da integração de (17) é mostrado a seguir:

$$D_t = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} \cdot (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) + D_0 \cdot e^{-K_2 t} \quad \text{Equação (17)}$$

onde: D_0 (mg/L) é o déficit inicial de oxigênio dissolvido de água, L_0 (mg/L) é a DBO no ponto de lançamento e K_1 e K_2 (dia^{-1}) são as constantes de desoxigenação e reoxigenação do rio, respectivamente.

A Equação (19) permite acompanhar a variação do déficit de OD ao longo do tempo. Entretanto, o interesse prático diz respeito à variação do déficit ao longo do curso da água a jusante de um ponto de lançamento de esgoto. Na hipótese de movimento permanente e uniforme, é possível substituir t por x da seguinte maneira:

$$t = \frac{x}{U} \quad \text{Equação (18)}$$

onde x é a distância a jusante do ponto de lançamento (m) e U é a velocidade média do rio (m/s). Combinando-se (17) e (18):

$$D_t = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} \cdot \left(e^{-K_1 \frac{x}{U}} - e^{-K_2 \frac{x}{U}} \right) + D_0 \cdot e^{-K_2 \frac{x}{U}} \quad \text{Equação (19)}$$

A Figura 4 mostra o comportamento do OD em função da distância à jusante do ponto de lançamento (curva pontilhada). O déficit máximo não ocorre no ponto de lançamento do efluente, mas a uma distância x_c obtida quando se iguala à zero a variação do déficit de oxigênio em relação à x . Assim procedendo, obtém-se:

$$\frac{dD}{dx_{x=x_c}} = 0 \rightarrow x_c = \frac{U}{K_2 - K_1} \cdot \ln \left[\frac{K_2}{K_1} \cdot \left(1 - \frac{D_0 \cdot (K_2 - K_1)}{K_1 L_0} \right) \right] \quad \text{Equação (20)}$$

O modelo de Streeter-Phelps necessita de uma pequena quantidade de dados e parâmetros de entrada, possuindo assim uma grande simplicidade conceitual, porém ainda é muito aplicado em nosso país (von Sperling, 2007).

3.4.3. Transporte de massa em rios

As mudanças nas concentrações dos constituintes ao longo do percurso de um rio são devidas à advecção, difusão e conversão (von Sperling, 2007 *apud* Chapra 1997). A Figura 7 é uma representação desses fenômenos.

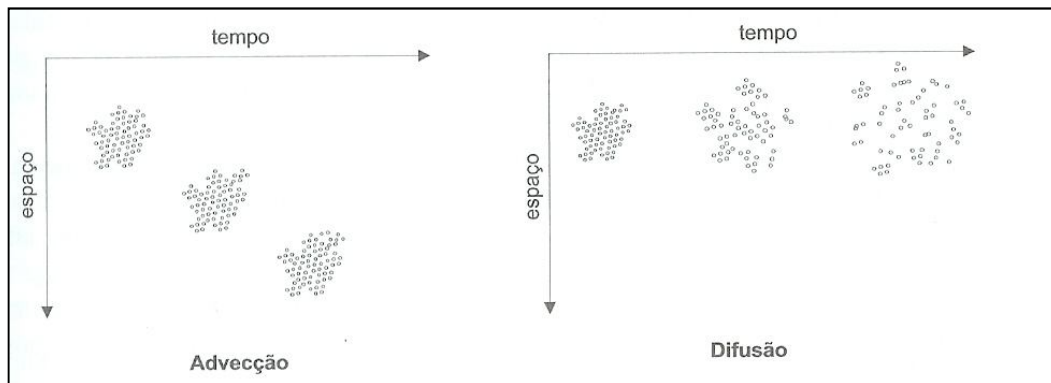


Figura 7 – Representação do transporte de uma substância no espaço e no tempo devido à advecção e difusão, representados pelo gráfico à esquerda e direita, respectivamente (von Sperling, 2007) .

A advecção é o resultado do movimento unidirecional do fluido, não alterando as características da substância a ser transportada. A advecção transporta a matéria de uma posição no espaço para outra. No caso de rios, a advecção move o constituinte de montante para jusante, como resultado do movimento do próprio líquido. Nos rios, a advecção é o principal mecanismo de transporte dos constituintes.

A difusão refere-se ao movimento da massa devido ao movimento aleatório do líquido ou à mistura. Esse transporte causa o espalhamento e diluição do constituinte ao longo do tempo, com um desprezível movimento do seu centro de massa. Numa escala microscópica, a difusão molecular resulta do movimento aleatório Browniano das moléculas de água. Numa escala maior, um movimento aleatório também ocorre causado pela difusão turbulenta. Ambas têm a tendência de minimizar diferenças de concentração pelo fato de moverem a massa de regiões de alta concentração para regiões de baixa concentração (Chapra, 1997). A difusão pode ser modelada por:

$$J_x = -D \cdot \left(\frac{dc}{dx} \right) \quad \text{Equação (21)}$$

onde,

J_x = fluxo de massa na direção x ($ML^{-2}T^{-1}$) e

D = coeficiente de difusão (L^2T^{-1}).

Esta equação é a primeira Lei de Fick e especifica que o fluxo de massa é proporcional ao gradiente de concentração. Num tanque coberto, o coeficiente de difusão é baixo. No caso de agitação do tanque, esse coeficiente seria maior.

A dispersão seria o efeito conjunto da difusão molecular/turbulenta e da advecção. Por exemplo, no meio de um rio, existe um predomínio do movimento advectivo, porque o gradiente de velocidades é maior. Já, próximo às margens, predomina o transporte difusivo, pois se tem uma maior formação de vórtices. O equilíbrio dos dois fenômenos condiciona a uma concentração homogênea ao longo da seção transversal do rio (Menegon, 2005).

3.4.4. Modelos de cargas pontuais

Os modelos de cargas pontuais são utilizados para examinar as interações entre as cargas de poluentes e sua resposta em corpos hídricos, avaliando a capacidade de assimilação desses corpos através de diferentes cenários. As cargas pontuais são geralmente fáceis de serem identificadas, uma vez que estão associadas a atividades localizadas.

Tais modelos variam consideravelmente em relação à complexidade: desde programas que calculam a concentração de oxigênio dissolvido de maneira uniforme ao longo de um rio até aqueles que processam interações entre nutrientes e florações algais. Tipicamente desenvolvem um balanço de massa para um ou mais constituintes, levando em consideração três fatores: transporte através do sistema (regime hidrológico e hidráulico), reações dentro do sistema (reações químicas, físicas e biológicas que afetam as variáveis) e entradas junto ao sistema (lançamentos ou subtrações de água do sistema por atividades antrópicas e naturais).

Segundo EPA (1995), para propósito de discussão, esses programas podem ser divididos em três classes: modelos hidrodinâmicos, modelos uniformes de qualidade da água e modelos dinâmicos de qualidade da água.

Os hidrodinâmicos simulam as características do transporte da água pela sua velocidade do escoamento. Tais modelos podem representar os aspectos do

movimento da água em rios, lagos, reservatórios e estuários. Dependendo do tipo de sistema ser simulado e das capacidades do modelo, é possível a simulação de escoamentos 1-D na longitudinal, 2-D na vertical, 2-D na horizontal e até 3-D.

3.4.5. Modelos de cargas difusas

Os modelos de cargas difusas simulam a geração e o movimento dos poluentes do ponto de origem até a descarga nos corpos d'água (EPA, 1995). A previsão do movimento desses poluentes é basicamente função do uso e ocupação do solo, sendo que alguns programas mais sofisticados descrevem os processos de precipitação, escoamento superficial e arraste de sedimentos.

Segundo Braga *et al* (2008), as cargas difusas são cargas poluidoras que provêm de atividades que depositam poluentes de forma esparsa sobre a área de contribuição da bacia hidrográfica. Essas cargas poluidoras chegam aos corpos hídricos de forma intermitente, associadas a eventos de precipitação e são geradas a partir de extensas áreas de ocupação antrópica, tornando difícil associar-se a elas um ponto de origem.

3.4.6. Modelos ecológicos

A modelagem numérica do ecossistema compreende estudos que examinam ou preveem o status de um habitat ou uma comunidade biológica, de maneira a fornecer uma interpretação do estado da saúde ecológica de um corpo hídrico.

A aplicação de modelos ecológicos é importante quando se deseja avaliar o nível de comprometimento das espécies naturais de um corpo hídrico de maneira que a qualidade da água permita o desenvolvimento desses seres. Assim, o uso desses programas é uma nova área da ciência que foca a quantificação das relações entre os componentes bióticos e abióticos de um ecossistema, incluindo a simulação das dinâmicas das populações e comunidades, estimativa do balanço de oxigênio, comportamento de substâncias tóxicas e seus impactos na comunidade biológica, além da modelagem da eutrofização (EPA, 1995).

3.4.7. Calibração de modelos de qualidade de água

A calibração consiste na variação dos parâmetros do modelo de maneira a obter uma concordância ótima entre os resultados calculados e os dados observados (Chapra, 1997). Tal estágio da modelagem é também definido por von Sperling (2007) como a estimativa dos parâmetros (coeficientes) integrantes das equações.

Após a medição em laboratório dos dados de qualidade da água, torna-se necessário o ajuste dos parâmetros do modelo. Na Figura 8, Chapra (1997) propõe uma maneira sistemática de se obter o melhor ajuste, onde os parâmetros cinéticos são separados do restante das informações assumindo que os outros parâmetros estão bem definidos.

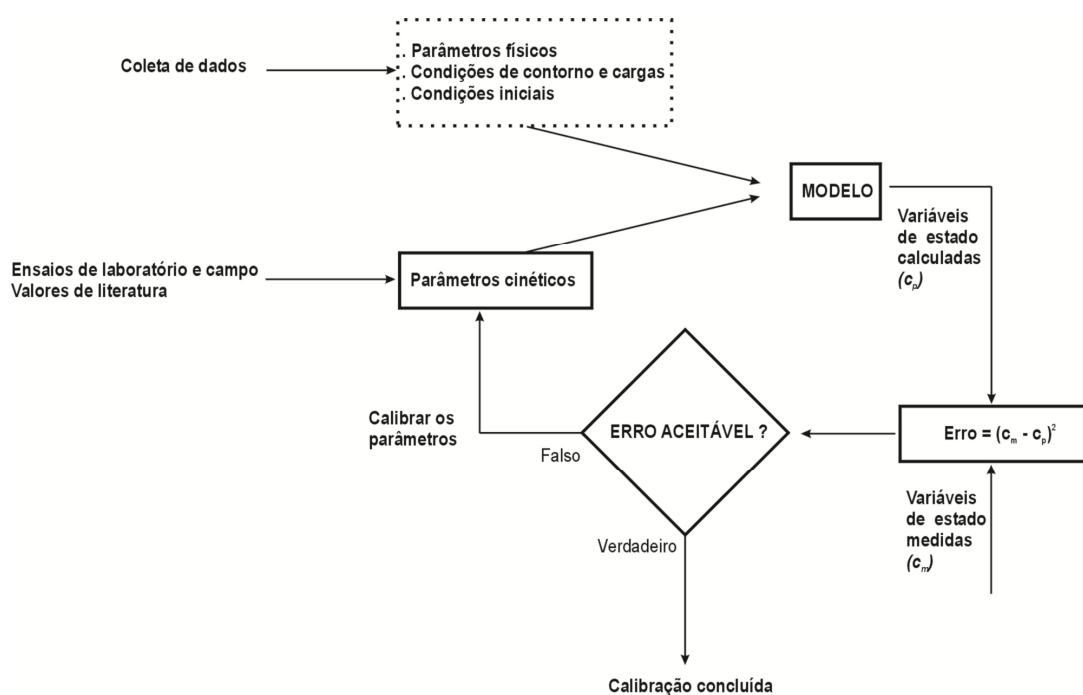


Figura 8 – Diagrama esquemático do processo de calibração de modelos - Fonte: adaptação de Chapra (1997).

Assim, antes do início do processo de calibração é necessária a medição das cargas lançadas ao sistema, condições de contorno e condições iniciais com suficiente precisão para não se tornarem fontes de incerteza. De maneira similar torna-se necessária uma caracterização acurada da geometria e hidráulica do sistema. Com

essas informações disponíveis, tais parâmetros físicos devem se manter fixos na calibragem.

Uma vez definidos os parâmetros físicos, o foco da calibração torna-se o ajuste dos parâmetros cinéticos. Alguns destes podem ser medidos em campo ou estimados a partir das variáveis de estado observadas, sendo que os parâmetros restantes devem ser variados dentro de um intervalo razoável e coerente até a obtenção de um ajuste ótimo.

Existem muitas maneiras para a realização dos ajustes, desde o procedimento informal de tentativa e erro até técnicas computacionais automáticas que buscam obter um valor ótimo para uma determinada função de erro, geralmente a minimização da soma dos quadrados dos erros.

3.4.7.1. Avaliação do ajuste do modelo

Existem duas maneiras principais de para avaliação da calibração de um modelo: a forma subjetiva e a objetiva. A primeira é baseada na comparação visual entre as simulações e os dados enquanto que na segunda é necessária uma quantificação da medição da qualidade do ajuste (usualmente uma medição do erro), sendo que o modelador ajusta os parâmetros até o momento em que esse erro atinja um valor mínimo (Tao, 2008).

Segundo von Sperling (2007), existem distintas abordagens para se inferir sobre a qualidade do ajuste, dentre elas a visualização de gráficos, coeficiente de determinação, raiz média dos erros ao quadrado (RMEQ), erro relativo e análise da regressão entre os valores estimados e observados.

a) Visualização de gráficos

É uma maneira simples de avaliação do ajuste, onde se busca obter a maior proximidade entre os dados observados e calculados pelo modelo em um gráfico plotado com as distâncias no eixo horizontal. Pela agilidade e praticidade, é mais indicado em modelos mais simples que possuam menor quantidade de parâmetros,

porém pode ser útil para complementar uma avaliação de resultados obtidos a partir de uma abordagem mais complexa.

b) Coeficiente de determinação

O coeficiente de determinação (CD) é uma relação entre a soma dos resíduos ao quadrado e a variância total dos dados observados, sendo expresso como:

$$CD = 1 - \frac{\sum(Y_{obs} - Y_{est})^2}{\sum(Y_{obs} - Y_{obsmédio})^2} \quad \text{Equação (22)}$$

Onde:

Y_{obs} = valor observado

Y_{est} = valor estimado

$Y_{obsmédio}$ = média dos valores observados

Os valores de CD podem variar entre $-\infty$ a $+1$, sendo que para CD positivo o valor representa a fração da variância total dos dados observados que é explicada pelo modelo; CD igual a 1 indica perfeito ajuste entre os dados observados e estimados; CD igual a zero indica que o modelo conduz a um ajuste equivalente ao de um modelo composto por uma reta horizontal que passa pelo valor médio dos pontos observados; CD negativo indica que o modelo conduz a um ajuste não melhor que o de um modelo composto por uma reta horizontal que passa pela média dos pontos observados.

c) Raiz média dos erros ao quadrado (RMEQ)

$$RMEQ = \sqrt{\frac{\sum(Y_{obs} - Y_{est})^2}{n}} \quad \text{Equação (23)}$$

Onde:

Y_{obs} = valor observado

Y_{est} = valor estimado

n = número de dados

A RMEQ tem bom comportamento estatístico e proporciona uma medição direta do erro do modelo. Se RMEQ é dividida pela média da variável observada ($RMEQ/Y_{obsmédio}$), ela dá uma indicação da magnitude relativa do erro (Thomann, 1982).

A soma dos quadrados resulta num valor que deve ser um mínimo quando os prognósticos e as medições são concordantes. Ademais tal estatística fornece um resultado que pode ser avaliado conforme os parâmetros são variados (Pelletier *et al*, 2006).

d) Erro relativo

$$ER(\%) = 100 \cdot \frac{|Y_{obsmédio} - Y_{estmédio}|}{Y_{estmédio}} \quad \text{Equação (24)}$$

Onde:

$Y_{obsmédio}$ = média dos valores observados

$Y_{estmédio}$ = média dos valores estimados

Por ser um método relativo pode ser usada na comparação entre modelos. No entanto ela apresenta um fraco comportamento para baixos valores de $Y_{obsmédio}$, e não reconhece a variabilidade dos dados, Além disso, esta estatística é pobre quando $Y_{obsmédio}$ é maior que $Y_{estmédio}$, pois nesta condição o máximo erro relativo é 100% (Thomann, 1982).

e) Análise da regressão entre os valores estimados e observados

A regressão linear é uma das estatísticas utilizadas com maior frequência entre os dados estimados e observados. Pressupõe-se que se R^2 da regressão for próximo a 1, o ajuste é bom. Porém, ocorrem casos em que R^2 é igual a 1 mas os valores observados e estimados ao longo do tempo plotados em um gráfico não possuem boa aderência. Assim, torna-se necessária a avaliação através da visualização de gráficos.

3.4.7.2. Aplicação de algoritmos genéticos para calibração de modelos

Os algoritmos genéticos (AG) são modelos de otimização baseados na evolução dos seres vivos, sendo que os primeiros estudos foram desenvolvidos nos anos 70 por

Holland (1975) na Universidade de Michigan, nos Estados Unidos. Os AG's maximizam os resultados do modelo comparados aos dados medidos em campo através da definição, feita pelo usuário, do tamanho da população a ser simulada, que será constante durante todo o processo evolutivo do algoritmo (Guedes *et al*, 2009).

O termo algoritmo genético (AG) é fruto de uma analogia entre um conjunto de operações matemáticas e algumas ideias de Darwin sobre seleção natural. Segundo Darwin, a natureza seleciona os seres mais adaptados ao meio ambiente, favorecendo assim sua reprodução. Dessa forma, seres menos adaptados são eliminados ou sofrem uma redução drástica no seu número de indivíduos. Esse mecanismo permite que as diferenças que facilitam a sobrevivência em um dado meio sejam transmitidas às gerações seguintes. Com a repetição desse ciclo, essas características firmam-se e dão origem a novas espécies mais bem adaptadas ao meio em que vivem (Leonardi, 2002).

Em essência, pode-se afirmar que AG são mecanismos de busca e otimização inspirados nos princípios da seleção natural e evolução. As principais características de um AG são: a) codificação de variáveis; b) teste simultâneo de soluções; c) utilização de operadores de procura aleatória. Na elaboração de AG, conceitos como adaptação, sobrevivência, reprodução e mutação são redefinidas para dar origem a elegantes e poderosos algoritmos aptos à resolução de uma enorme variedade de problemas (Leonardi 2002).

Segundo Carvalho (2005), a evolução tem produzido sistemas com capacidades enormes, através de mecanismos relativamente simples de autorreprodução que seguem algumas regras básicas:

a) evolução ocorre ao nível dos cromossomos. Ou seja, o organismo não evolui, apenas serve de veículo no qual os genes são conduzidos e passados adiante. São os cromossomos que sofrem alterações com o reagrupamento dos genes;

b) a natureza tende a fazer mais cópias dos cromossomos que produzem um organismo mais adaptado. Se um organismo sobrevive tempo suficiente e é saudável, seus genes têm uma capacidade maior de serem passados às próximas gerações através da reprodução;

c) a diversidade deve ser mantida na população. Aparentemente, mutações aleatórias acontecem com frequência na natureza com o objetivo de garantir a ocorrência de variações nos organismos. Estas mutações genéticas geralmente resultam numa útil, e até mesmo vital característica de sobrevivência das espécies. Com uma gama maior de possíveis combinações, uma população está menos sujeita a fraquezas comuns, como vírus, por exemplo, ou outros problemas associados à procriação consanguínea que poderiam vir a afetar e destruir todos os seus indivíduos.

Holland (1975) aplicou essas propriedades da evolução a sequencias simples de números que representavam os cromossomos. Codificando seu problema numa sequencia binária, para representar os cromossomos, e fazendo com que computadores gerassem muitas sequências binárias aleatórias, de forma a produzir uma população, determinou seu algoritmo genético que, apesar de simples e robusto, encontrou soluções ótimas para uma grande variedade de problemas.

Assim, nos algoritmos genéticos, a busca da solução para um problema é modelada em uma estrutura de dados que se assemelha a de um cromossomo. Com a aplicação de operadores são geradas combinações dessa estrutura, com a preservação de certas informações críticas. Uma implantação do algoritmo genético começa com uma população (geralmente randômica) de cromossomos que são então avaliadas para gerar oportunidades reprodutivas de forma que os cromossomos que representam uma solução “melhor” tenham mais chances de se reproduzir do que os que representam solução “pior”. Sendo as definições de solução melhor ou pior relativas à população atual.

Os algoritmos genéticos diferem dos tradicionais métodos de otimização em quatro aspectos importantes:

- a) Usam um código para as variáveis de controle ao invés das próprias variáveis;
- b) Pesquisam numa população a solução para outra população, ao invés de fazer uma pesquisa individual;
- c) Usam somente a informação da função objetivo e não de suas derivadas;

- d) Usam regras de transição probabilísticas ao invés de usar regras determinísticas.

A computação evolutiva engloba uma grande quantidade de métodos como os algoritmos genéticos (AG), programação evolucionária, programação genética, estratégias evolucionárias, entre outros (Kondageski, 2008). O algoritmo genético representa o método mais difundido e conhecido no universo da computação evolutiva; isto se deve ao fato de ser relativamente simples, flexível e de fácil implementação computacional (Lacerda *et al*, 1999).

Na natureza, indivíduos de uma população competem por recursos como alimentos, água e abrigo; também competem por um companheiro para o acasalamento. Aqueles indivíduos que possuem as melhores características para a sobrevivência, e para a atração do companheiro, provavelmente produzirão um maior número de descendentes. Por outro lado, indivíduos com características inferiores produzirão poucos (ou mesmo nenhum) descendentes. Isto significa que os genes daqueles indivíduos mais bem adaptados ao meio espalhar-se-ão por um número crescente de descendentes a cada geração. A combinação de excelentes características de diferentes pais pode resultar em indivíduos cuja aptidão é maior do que a dos pais. Desta forma, as espécies tornam-se cada vez mais adaptadas ao seu ambiente. Um algoritmo genético usa uma analogia deste comportamento natural; assim, as possíveis soluções do problema de otimização são denominadas de indivíduos, que podem ser agrupados, formando uma população. A aptidão de um indivíduo representa o grau ótimo da resposta produzida por ele, ou seja, o quão próximo ele está do ponto ótimo. Esta aptidão é calculada pela função-aptidão que, em alguns casos, pode ser a própria função que se deseja otimizar (Kondageski, 2008).

Empregar o AG para o cálculo de pontos de máximo ou mínimo de uma função é especialmente útil quando não é derivável ou é complicada de derivar, inclusive podendo ser descontínua. Nestas situações, a maioria das técnicas, principalmente de otimização numérica, não podem ser aplicadas. Além disso, esta técnica apresenta uma vantagem mais evidente quando se trabalha com otimização de funções mais

complexas, como funções não lineares, e que apresentem grande número de variáveis. Outro ponto a favor dos AG's consiste no fato de que a solução obtida por tal método, ou mesmo a convergência dele, não é excessivamente dependente do ponto inicial.

Ademais, os algoritmos genéticos apresentam algumas outras vantagens, pois funcionam tanto com parâmetros contínuos como discretos, ou uma combinação deles; realizam buscas simultâneas em várias regiões do espaço de busca, pois trabalham com uma população, e não com um único ponto, e desta forma reduzem consideravelmente a probabilidade de ocorrência de um mínimo local; fornecem uma lista de parâmetros ótimos e não uma simples solução; são fáceis de serem implementados em computadores; são modulares e portáteis, no sentido de que o mecanismo de evolução é separado da representação particular do problema considerado, assim, eles podem ser transferidos de um problema para outro; são flexíveis para trabalhar com restrições arbitrárias e otimizar múltiplas funções com objetivos conflitantes; são também facilmente hibridizados com outras técnicas de otimização (Lacerda *et al*, 1999).

Outros termos originados da biologia, e relacionados aos AG's (Lacerda *et al*, 1999) são:

Cromossomo - Nos AG's, um cromossomo representa a estrutura de dados que codifica uma solução para um problema, ou seja, um simples ponto no espaço de busca. Pode ser uma cadeia de bits, ou um vetor contendo as variáveis de decisão do problema de otimização;

Indivíduo - Um simples membro da população. Nos AG's, um indivíduo é formado pelo cromossomo e sua aptidão;

População – representa um conjunto de indivíduos da mesma espécie. Na linguagem dos AG's, representa um conjunto de pontos candidatos a solução do problema de otimização;

Gene - Na biologia é a unidade de hereditariedade que é transmitida pelo cromossomo e que controla as características do organismo. Nos AG's, é um parâmetro codificado no cromossomo, ou seja, um elemento do vetor que representa o cromossomo;

Genótipo - Na biologia representa a composição genética contida no Genoma, ou seja, o conjunto de genes de um indivíduo. Nos AG's, representa a informação contida no cromossomo;

Seleção - A seleção constitui o mecanismo de escolha dos indivíduos (pontos candidatos à solução) de acordo com os valores da função-objetivo, ou função-aptidão, na linguagem dos algoritmos genéticos. Aqueles com alto valor de aptidão têm maior probabilidade de contribuir com um ou mais descendentes para a próxima geração. Em populações naturais, a aptidão constitui a habilidade do indivíduo de sobreviver aos predadores, doenças e outros obstáculos para chegar à idade adulta e posterior reprodução;

Cruzamento (“crossover”) - O operador de cruzamento é aplicado a um par de indivíduos selecionado da população - os chamados indivíduos pais - gerando dois indivíduos filhos. É este operador que possibilita a introdução de novos indivíduos na população. É considerado, juntamente com a mutação, o principal mecanismo dos AG's, pois explora as regiões desconhecidas do espaço de busca. Existem vários tipos de operadores de cruzamento, tanto para representação binária, quanto para representação real dos cromossomos;

Mutação - Os operadores de mutação são necessários para a introdução e manutenção da diversidade genética da população. Este operador altera, arbitrariamente, um ou mais componentes de um cromossomo filho escolhido, fornecendo, assim, meios para a introdução de novos elementos na população. Desta forma, a mutação assegura que a probabilidade de se chegar a qualquer ponto do espaço de busca nunca será zero. O operador de mutação é aplicado aos cromossomos filhos com uma probabilidade de mutação igual à P_{mut} .

Além disso, tem-se outra definição importante: a simulação, que representa o ciclo que vai da geração aleatória de uma população inicial até a convergência do algoritmo.

Quando se inicia uma nova simulação gera-se uma nova população inicial, que evolui através de sucessivas gerações até atingir o critério de convergência definido, retornando com a melhor solução encontrada (Kodagenski, 2008).

A implementação de um algoritmo genético começa com a geração aleatória de uma quantidade de cromossomos, ou seja, de vetores contendo as variáveis de decisão do problema de otimização; ao conjunto destes dá-se o nome de população inicial. Estes vetores são avaliados durante o processo evolutivo e recebem uma nota que reproduz a qualidade da solução que eles representam. Aos mais aptos, ou seja, àqueles que produzirem as melhores soluções, é atribuída maior probabilidade de serem selecionados, de forma que eles geralmente são mantidos no processo do AG. Quanto aos menos aptos, esta probabilidade é menor, de forma que estes geralmente são descartados do processo. Aqueles vetores selecionados podem ser combinados para a formação de outros, os quais integrarão a população; este processo representa o chamado operador de “crossover” ou cruzamento. Além disso, os cromossomos formados no processo de cruzamento podem sofrer modificações em suas características fundamentais, através do operador de mutação. Desta forma, estes indivíduos gerados possuem algumas características herdadas dos cromossomos “pais”. Esta nova população de possíveis soluções produzidas contém uma maior proporção das características dos melhores indivíduos da geração anterior. Desta forma, características ótimas são espalhadas por muitas gerações na população, sendo misturadas e permutadas com outras boas características. Através do favorecimento do cruzamento dos melhores indivíduos da população, as áreas mais promissoras do espaço de busca são exploradas. Se o algoritmo foi bem elaborado, a população convergirá para uma solução ótima do problema (Kondageski, 2008).

A Figura 9 apresenta a configuração de um algoritmo genético típico.

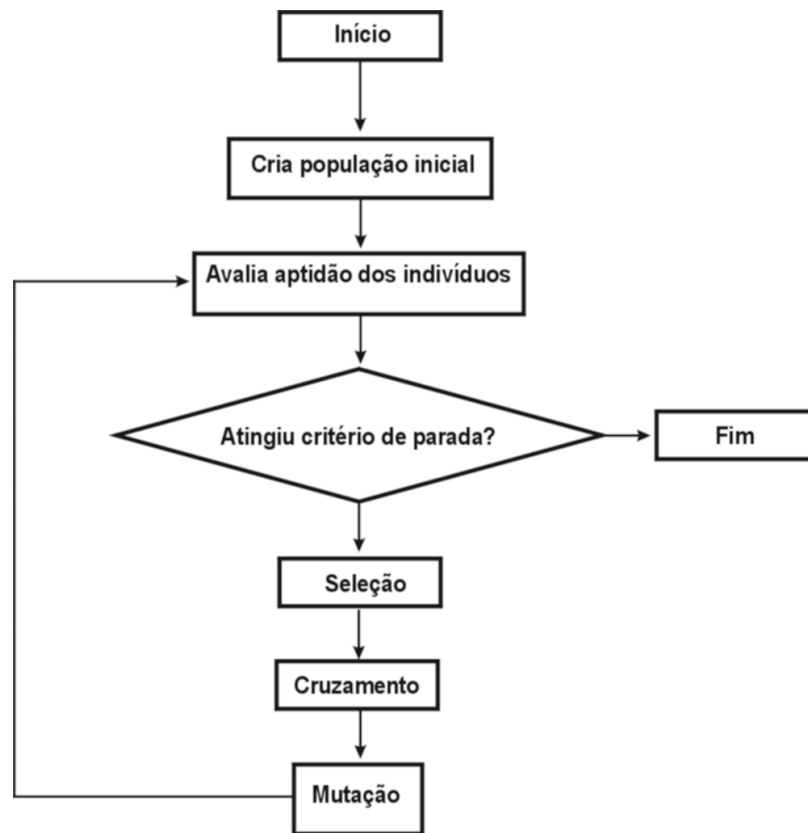


Figura 9 – Representação de AG típico (Kondageski, 2008).

Cada ciclo completo do algoritmo da Figura 9, desde a avaliação da aptidão, ou “fitness”, dos indivíduos, até a aplicação do operador de mutação, representa uma geração, na linguagem dos algoritmos genéticos.

3.4.8. Validação

Após a calibração do modelo e antes de sua utilização para a realização das simulações, deve-se realizar uma etapa de validação.

A validação do modelo consiste em novas simulações com uma nova série (ou idealmente várias séries) de dados observados e também de alterações nos parâmetros físicos e forçantes de maneira a representar as novas condições. Entretanto, os

parâmetros cinéticos devem ser fixados nos mesmos valores onde o modelo fora calibrado (Chapra, 1997).

Caso as novas simulações produzam valores que coincidam com os dados observados o modelo está validado como uma ferramenta efetiva de previsão para o intervalo das condições definidas pelas séries de dados utilizadas nas etapas de calibração e validação. Se não houver uma boa aderência o modelo deve ser analisado no sentido de se determinar as possíveis razões para tal discrepância, como um melhor refinamento e caracterização do problema.

Reckhow *et al* (1990) justificam a necessidade da validação (também intitulada de “análise de resíduos” pelos autores) dos modelos uma vez que as séries dos dados observados e estimados podem apresentar tendências e comportamentos cíclicos, os quais introduzem limitações para a utilização de testes estatísticos mais convencionais, como o teste “t”. No entanto, é menos provável a ocorrência destes fenômenos nos resíduos, fazendo com que seja preferível a sua utilização.

3.4.9. Análise da Incerteza

A Análise da Incerteza pode ser baseada na execução de um elevado número de simulações, configurando a denominada Simulação Monte Carlo. O número de rodadas deve ser maior quanto mais complexo for o modelo e maior o número de variáveis (dados de entrada).

Em cada simulação do modelo é selecionado um conjunto diferente de valores dos dados de entrada sobre os quais existe incerteza. Cada valor é gerado aleatoriamente, segundo uma distribuição e dentro de uma faixa de critérios pré-especificados. As saídas obtidas são posteriormente analisadas estatisticamente, gerando resultados em termos de probabilidade e não apenas valores determinísticos. O fluxograma da Figura 10 ilustra a Simulação Monte Carlo para Análise da Incerteza.

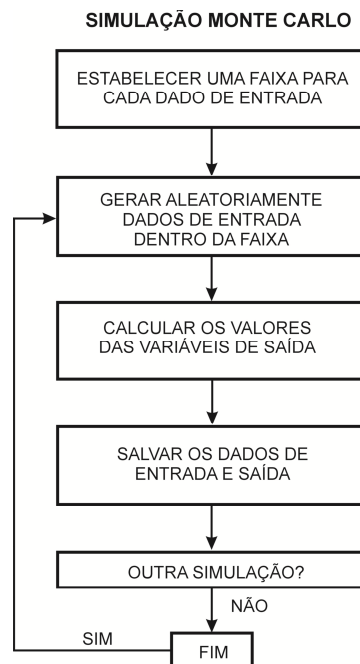


Figura 10 – Fluxograma da análise da incerteza (adaptado de von Sperling, 2007).

3.4.10. Análise de sensibilidade de modelos

Chapra (1997) recomenda que antes das simulações haja o conhecimento do comportamento geral de um modelo de qualidade de água através da análise de sensibilidade.

Existem muitas maneiras de se realizar tal tipo de análise, e dentre elas as mais usuais são a perturbação de parâmetros ou análise de sensibilidade informal (von Sperling, 2007), análise de sensibilidade de primeira ordem e a simulação Monte Carlo.

Na perturbação de parâmetros roda-se o modelo com diferentes valores deste dado e interpreta-se como resultado obtido foi influenciado por essa variação. O estabelecimento dos distintos valores do dado de entrada, bem como a interpretação acerca da sensibilidade do modelo, dependerá do conhecimento, experiência e bom senso do analista (von Sperling, 2007).

A análise de erros de primeira ordem trabalha com coeficientes normalizados de sensibilidade, os quais representam a porcentagem de variação na variável de saída

resultante de uma variação de x% em cada variável de entrada. São calculadas então, para cada variável de saída, as porcentagens da variância atribuídas para cada variável de entrada. O modelo QUAL2EUNCAS é capaz de realizar tal análise.

Já na simulação Monte Carlo Spear e Hornberger (1980) *apud* von Sperling (2007) sugerem um número elevado de corridas do modelo, cada qual com um conjunto diferente dos valores dos dados de entrada selecionados aleatoriamente dentro da distribuição específica.

Inicialmente separa-se o conjunto de dados em duas amostras distintas, de acordo com algum critério especificado. Após esta separação de todos os resultados nas duas amostras (“dentro” e “fora” do critério), procede-se a uma análise estatística comparando a distribuição de cada dado de interesse na amostra “dentro” com a distribuição deste mesmo dado na amostra “fora”. Caso as duas distribuições sejam significativamente diferentes, o dado é considerado importante para o desempenho do modelo, isto é, as estimativas do modelo (em termo do dado de saída considerado) são sensíveis a esse dado de entrada.

Caso contrário o dado é considerado não importante na faixa e distribuição especificadas, já que a diferença nos dados de saída das duas amostras não pode ser explicada por um dado de entrada que apresenta pouca variação de uma amostra para a outra. O fluxograma da Figura 11 ilustra o processo.

FLUXOGRAMA DA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

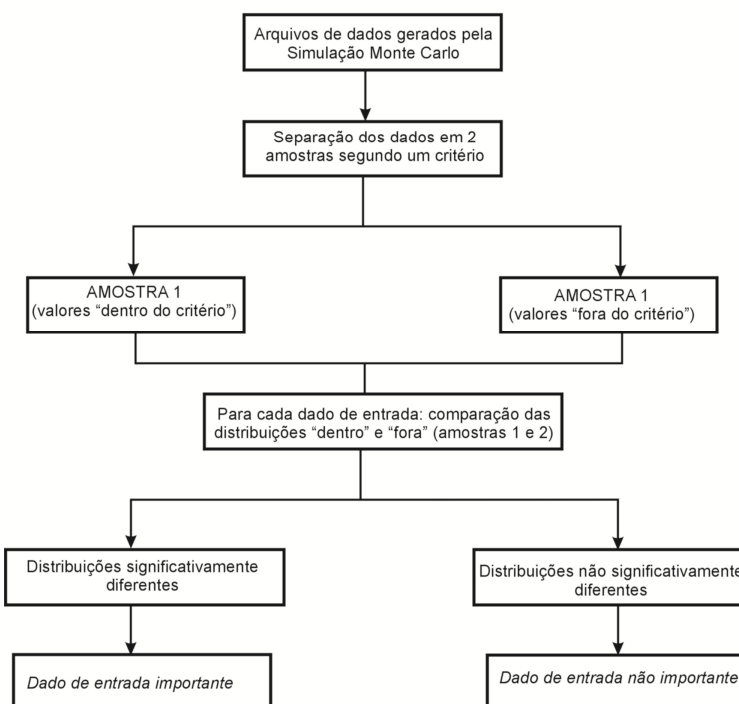


Figura 11 – Fluxograma da análise de sensibilidade (adaptado de von Sperling, 2007).

O teste estatístico de comparação entre as duas amostras deve ser um teste não paramétrico, o qual independe da distribuição de frequência da amostra, como o teste de comparação de medianas de Mann-Whitney ou um teste de hipóteses convencional (teste t para a diferença entre duas médias).

3.4.11. Seleção de modelos de qualidade de água

A definição do modelo apropriado depende da finalidade na qual ele será aplicado. A definição dos objetivos é o primeiro passo no desenvolvimento da aproximação a ser realizada pela modelagem, sendo que em alguns casos os objetivos serão somente atingidos com a aplicação de uma combinação de modelos. Em outros casos, técnicas de avaliação mais simples poderão ser suficientes para substanciar o processo decisório. Assim, a seleção de modelos pode ser baseada em critérios como os recursos financeiros considerados, necessidade de dados, custo da aplicação do modelo, precisão requerida, tipos de poluentes considerados e experiência do usuário.

A seleção e aplicação de um modelo ou uma ferramenta de análise é sempre uma parte do processo de construção do consenso de um plano para a bacia hidrográfica. O envolvimento das partes interessadas no processo de seleção do modelo pode ajudar na aceitação dos resultados obtidos nas simulações e ainda fazer com que as decisões a serem tomadas passem a ser baseadas nesses resultados (EPA, 1997).

O progresso da ciência e da programação de computadores junto às evoluções dos problemas ambientais permitiram o desenvolvimento de modelos mais complexos e de estruturas mais abrangentes. Infelizmente tal fato conduz à concepção errônea de que modelos complexos são necessariamente superiores a aproximações mais simples [Chapra (2003), Lindenschmidt (2006) e Thomann (1998)].

A Figura 12 ilustra que a escolha de um modelo de qualidade de água envolve um conflito entre a complexidade do modelo, a confiabilidade requerida, custos para coleta de dados estimativa de parâmetros e tempo.

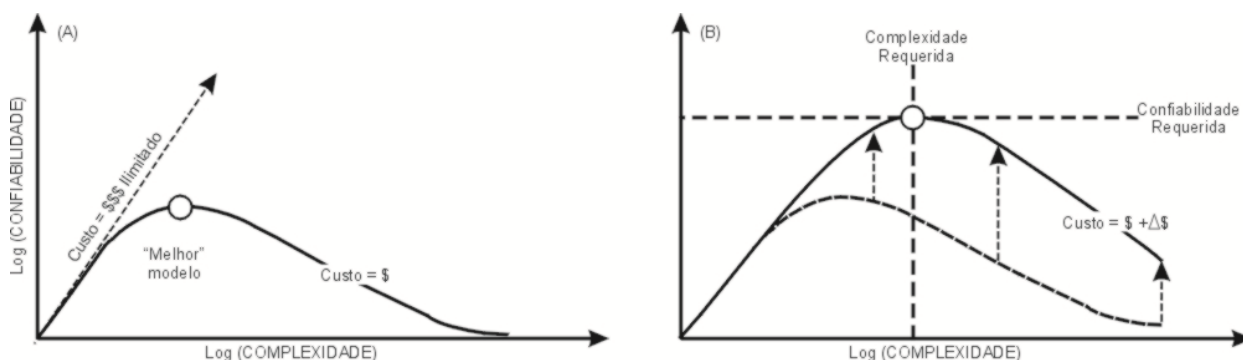


Figura 12 – Confiabilidade versus complexidade de modelos: (A) modelagem isolada de decisões; (B) modelagem influenciada pelo contexto das decisões - Fonte: adaptação de Chapra (2003).

O gráfico (A) da Figura 10 representa que se o orçamento é ilimitado então um modelo mais complexo será mais confiável. Porém, ao adicionar-se complexidade ao modelo, é assumido que haverá recursos financeiros suficientes para coleta de dados de campo e estudos de laboratório para especificar adequadamente os parâmetros adicionais. Ademais, essa afirmação não é verdadeira pois existem limites nas habilidades de caracterizar o meio ambiente de maneira matemática (Chapra, 2003).

Na realidade, em função das limitações financeiras, a modelagem matemática é realizada com dados limitados. Nesses casos podem ocorrer duas situações:

- i. Um modelo muito simples será tão irreal que não produzirá resultados confiáveis;
- ii. Um modelo muito complexo será tão “superparametrizado” que ultrapassará as informações disponíveis e se tornará igualmente irreal em função da incerteza dos parâmetros.

Assim, duas outras considerações devem ser impostas: a confiabilidade e a complexidade necessárias para resolver o problema (gráfico (B) da Figura 10). Como exemplo, enquanto que um modelo simples é adequado para avaliar impactos estéticos, um modelo mais complexo (e mais dados de entrada) é necessário para avaliar problemas de saúde pública (Chapra, 2003).

Outro fator importante na seleção de modelos é o tempo necessário para levantamento dos dados de campo e de simulação via computadores, uma vez que muitos programas usarão dados históricos insuficientes na tentativa de produzir resultados confiáveis e, simultaneamente, ao adicionar complexidade o tempo de computação aumenta significativamente.

Ainda em relação à seleção de modelos, Kauark-Leite e Nascimento (1993) *apud* von Sperling (2007) citam que aqueles devem apresentar as seguintes propriedades:

- ✓ **Coerência racional:** deve haver uma coerência da transcrição que se faz entre os objetos ou fenômenos percebidos e sua tradução na linguagem teórica escolhida;
- ✓ **Ajuste aos dados experimentais:** espera-se que o modelo seja capaz de gerar resultados que se aproximem dos dados experimentais. No entanto, o mero ajuste a um conjunto de dados não é suficiente para que o modelo possa ser considerado totalmente adequado;
- ✓ **Unicidade e identificabilidade:** é possível se construírem distintos modelos representando um mesmo fenômeno, mas a justificativa da adoção de um determinado modelo não deve se basear apenas no ajuste dos dados experimentais. Deve-se buscar um modelo único para um dado nível de representação (unicidade

de representação do sistema) e se ajustarem os parâmetros de modelos a partir dos dados experimentais, obtendo-se um conjunto único de parâmetros (identificabilidade dos parâmetros). Deve-se atentar para o fato de que os modelos ambientais podem ser bastante complexos e com pouca identificabilidade, com distintos conjuntos de valores dos coeficientes conduzindo a ajustes similares aos dados experimentais;

✓ **Minimalidade:** o conceito de minimalidade é de que, se um modelo simples é suficiente, nenhum outro modelo mais complexo é necessário. A minimalidade concerne à economia dos meios utilizados (mínimo número de variáveis e de parâmetros) ou, ainda, o princípio da redução do arbitrário. O princípio da minimalidade não busca a simples redução da complexidade, mas a redução prudente da redundância. Naturalmente que o princípio é desejável, mas deve ser praticado com critério, para não cercear o avanço do conhecimento científico;

✓ **Falsificabilidade:** a falsificabilidade concerne à possibilidade de se invalidarem hipóteses assumidas na construção do modelo. Uma hipótese é falsificável se a lógica autoriza a existência de um enunciado ou de uma série de enunciados de observação que lhe seriam contraditórios, que a falsificariam, caso se revelassem verdadeiros. Toda hipótese ou todo sistema de hipótese deve satisfazer esta condição fundamental para adquirir o status de lei ou teoria científica. Para fazer parte da ciência uma hipótese deve ser falsificável, ou seja, deve ser possível invalidá-la. Naturalmente que, no caso da modelagem matemática de sistemas ambientais, os meios experimentais disponíveis podem ser insuficientes para se provar a inadequação de uma hipótese;

✓ **Poder de previsão:** os critérios anteriores dizem respeito à coerência racional do modelo e das observações utilizadas em sua construção. Já o poder de previsão encontra-se relacionado com a extensão de seu domínio de validade. Um modelo encontra-se tanto mais justificado quanto mais amplo se mostra seu campo de aplicabilidade, a posteriori. Neste sentido, modelos caixa preta (aqueles que enfocam apenas o que é mensurável, ou seja, dados de entrada e saída), mesmo que eventualmente tenham conduzido a um melhor ajuste aos dados experimentais, tem

menor poder de previsão que modelos mecânicos (modelos conceituais fisicamente fundamentados).

3.5. O modelo QUAL2Kw

O QUAL2Kw é um modelo de qualidade da água de cargas pontuais e difusas aplicado em rios e córregos, distribuído pela Agência Norte Americana de Proteção Ambiental (USEPA). Este modelo é implementado em extensão Microsoft Windows, utiliza como macro linguagem o Visual Basic, sendo o Excel utilizado como programa de interface gráfica. Ele representa o estado da arte e as duas últimas décadas de avanços na modelagem numérica e computacional de qualidade da água em rios (Tao, 2008).

O modelo QUAL2Kw foi escolhido no presente trabalho uma vez que atende aos preceitos de ampla utilização, ser o modelo oficial da EPA e inclusive fora utilizado em diversas pesquisas recentes [Bottino (2008); Tao (2008); Salvai (2008); Fan *et al* (2007); Fan *et al* (2009); Marsili-Libelli *et al* (2008); Chaminda *et al* (2007); Turner *et al* (2009); Guedes *et al* (2009)].

Esse modelo é baseado em equações diferenciais ordinárias para sistemas unidimensionais e de fluxo constante (regime permanente de vazões). O modelo possui, também, como um de seus pilares a homogeneidade da concentração da variável limnológica em estudo numa mesma seção transversal, podendo ser utilizado para simular o comportamento de diversos indicadores e constituintes de qualidade de água (Guedes *et al*, 2009).

O modelo QUAL2Kw possui algumas características do modelo QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987), bastante difundido em estudos de qualidade da água. As semelhanças entre os modelos são (Pelletier *et al*, 2008):

- O escoamento é unidimensional e é considerada mistura completa no rio verticalmente e lateralmente;

- O saldo de calor e temperatura é simulado como função da meteorologia em uma escala de tempo diurna;
- Todas as variáveis são simuladas em uma escala de tempo diurna, uma vez que a cinética da qualidade de água é diurna;
- São simuladas fontes pontuais e cargas difusas de calor e massa.

A estrutura do QUAL2Kw inclui os seguintes novos elementos:

- A segmentação no modelo QUAL2E só poderia ser igualmente espaçada. Já no QUAL2Kw é possível simular trechos de comprimentos diferentes e ainda podem-se adicionar múltiplos lançamentos e abstrações em qualquer trecho, fornecendo uma maior liberdade ao usuário caso necessite de maior resolução em um determinado trecho. Os tributários podem ser representados como fontes pontuais. A Figura 13 apresenta um esquema da segmentação que o programa assume.

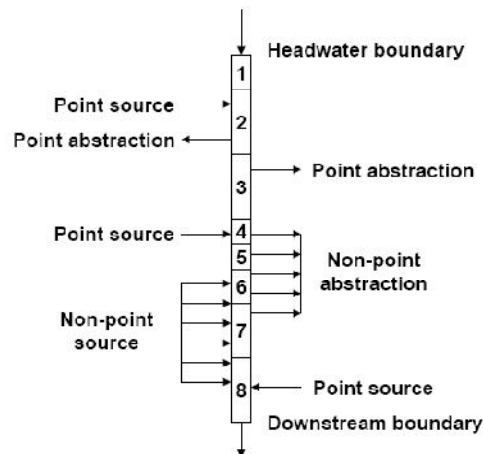


Figura 13 – Esquema de segmentação do QUAL2Kw (FONTE: Pelletier *et al*, 2008).

Pelo fato do software QUAL2Kw considerar o rio como uma junção de diversos segmentos (com dimensão determinada no momento de criação de cada modelo), limita-se a precisão dos dados de saída a essas divisões. Ou seja, os dados são fornecidos pontualmente apenas nas intersecções dos segmentos e não em qualquer local do rio. O curso d'água é dividido em um número de elementos computacionais e,

para cada elemento, é feito um balanço hidrológico em termos de fluxo (m^3/s), balanço energético em termos de temperatura e balanço de massa em termos de concentração.

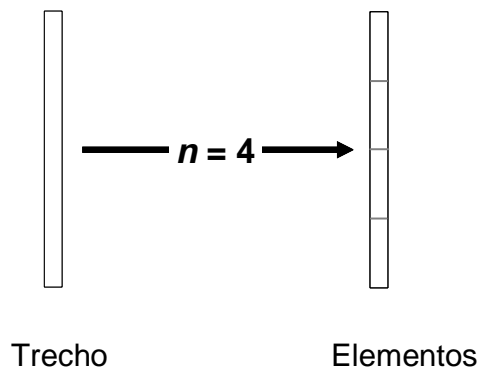


Figura 14 – Divisão dos trechos em elementos (FONTE: Pelletier *et al*, 2008).

- No modelo QUAL2Kw são usadas duas formas de DBO carbonácea para representar o carbono orgânico. Essas formas são a lentamente oxidável e rapidamente oxidável. Ademais, partículas de matéria orgânica não viva (detritos) são simuladas. Esses detritos são compostos por carbono particulado, nitrogênio e fósforo em uma estequiometria fixada;
- O modelo QUAL2Kw adapta a anóxia por redução das reações de oxidação à ordem zero para baixas concentrações de oxigênio dissolvido;
- A desnitrificação é modelada como uma reação de primeira ordem que se torna mais pronunciada em baixas concentrações de oxigênio dissolvido;
- Interação entre sedimento e água: fluxos de oxigênio dissolvido sedimento-água são simulados como função da sedimentação da matéria orgânica particulada, reações com os sedimentos e a concentração das formas solúveis nas camadas de água superiores;
- Simula explicitamente as algas fixas ao fundo, que aumentam através da fotossíntese e decrescem por meio da morte e respiração. Tais algas excretam amônia e fosfatos inorgânicos e absorvem amônia ou nitrato e fósforo;
- A extinção da luz é calculada em função das algas, detritos e sólidos inorgânicos;

- Tanto a alcalinidade quanto o carbono inorgânico são simulados. O pH do rio é então simulado baseado nessas duas quantificações, sendo que valores de pH altos provocam a transformação da amônia para a forma ionizada (NH_4^+) tóxica;
- Um patógeno genérico é simulado e a sua remoção é determinada em função da temperatura, luz e sedimentação;
- Simulação explícita do efeito de quedas d'água em função de cachoeiras e barragens na transferência de gases
- Autocalibração dos parâmetros através do algoritmo genético PIKAIA.

No entanto, a estrutura do QUAL2Kw não inclui os seguintes elementos:

- Módulo de análise de incerteza;
- Derivações, uma vez que só simula o rio principal.

Dentre esses fatores, a simulação das algas de forma explícita e o algoritmo genético para autocalibração também influenciaram a seleção do QUAL2Kw.

O modelo QUAL2Kw resolve as equações internas através de integração numérica direta pelo método de Euler ou o método Runge-Kutta. Dependendo do tempo de residência pode ser necessário que o usuário simule mais alguns dias até que se atinja o estado de equilíbrio, conforme estudo realizado por Turner *et al* (2009).

3.5.1. Balanço de vazão

O balanço de vazões para cada trecho é calculado pela seguinte equação:

$$Q_i = Q_{i-1} + Q_{in,i} - Q_{ab,i} \quad \text{Equação (25)}$$

Sendo Q_i a vazão efluente do trecho i para o trecho de jusante $i+1$ (em m^3/d), Q_{i-1} a vazão afluyente do trecho de montante $i-1$ (m^3/d), $Q_{in,i}$ a vazão total afluyente de fontes pontuais ou não pontuais (m^3/d) e $Q_{ab,i}$ a vazão total afluyente devido a abstrações pontuais e não pontuais (m^3/d). A Figura 15 apresenta uma ilustração do balanço de vazões para cada trecho.

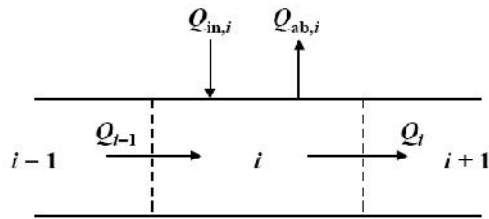


Figura 15 – Ilustração do balanço de vazões (FONTE: Pelletier *et al*, 2008).

A vazão total afluyente das fontes é computada como:

$$Q_{in,i} = \sum_{j=1}^{psi} Q_{ps,i,j} + \sum_{j=1}^{npsi} Q_{nps,i,j} \quad \text{Equação (26)}$$

onde $Q_{ps,ij}$ é a j -ésima fonte pontual afluyente ao elemento i (m^3/d), $Q_{ps,i}$ é o número total de fontes pontuais ao elemento i , $Q_{nps,ij}$ é a j -ésima fonte não pontual afluyente ao elemento i (m^3/d) e $npsi$ é o número total de fontes não pontuais afluyentes ao elemento i . O total de abstrações é calculado como

$$Q_{ab,i} = \sum_{j=1}^{pai} Q_{pa,i,j} + \sum_{j=1}^{npai} Q_{npa,i,j} \quad \text{Equação (27)}$$

onde $Q_{pa,ij}$ é a j -ésima fonte pontual abstraída do elemento i (m^3/d), pai é o número total de fontes pontuais abstraídas ao elemento i , $Q_{npa,ij}$ é a j -ésima fonte não pontual abstraída ao elemento i (m^3/d) e $npai$ é o número total de fontes não pontuais abstraídas ao elemento i . As fontes não pontuais (cargas difusas) e abstrações são consideradas como fontes lineares, conforme a Figura 16.

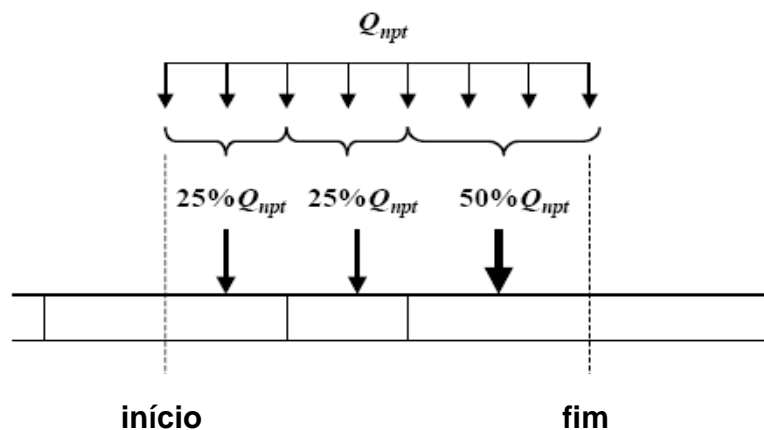


Figura 16 – Representação das cargas difusas no modelo QUAL2Kw (FONTE: Pelletier *et al*, 2008).

3.5.2. Características hidráulicas

Uma vez computada a vazão efluente de cada elemento, a velocidade e a profundidade podem ser calculadas por vertedouros, coeficientes de descargas ou equação de Manning.

- *Equação de Manning*

Para o modelo, cada elemento é idealizado como um canal trapezoidal. Em condições de vazões permanentes, a equação de Manning pode ser usada para expressar a relação entre a vazão e a profundidade como:

$$Q = \frac{S_0^{1/2}}{n} \frac{A_c^{5/3}}{P^{2/3}} \quad \text{Equação (28)}$$

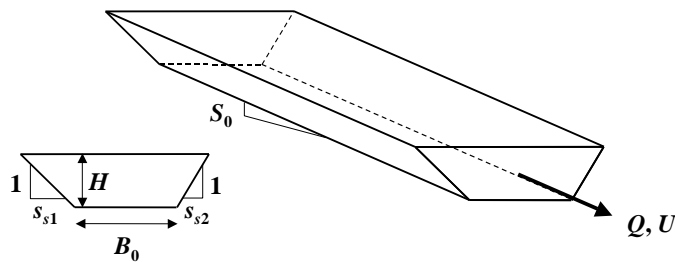


Figura 17 – Esquema para determinação da vazão no modelo QUAL2Kw (FONTE: Pelletier et al, 2008).

onde S_0 é a declividade do canal, A_c é a área molhada, n é o coeficiente de rugosidade do canal e P é o perímetro molhado.

$$A_c = [B_0 + 0,5(s_{s1} + s_{s2})H]H \quad \text{Equação (29)}$$

$$P = B_0 + H\sqrt{s_{s1}^2 + 1} + H\sqrt{s_{s2}^2 + 1} \quad \text{Equação (30)}$$

$$H_k = \frac{(Qn)^{3/5} \left(B_0 + H_{k-1} \sqrt{s_{s1}^2 + 1} + H_{k-1} \sqrt{s_{s2}^2 + 1} \right)^{2/5}}{S_0^{3/10} [B_0 + 0,5(s_{s1} + s_{s2})H_{k-1}]} \quad \text{Equação (31)}$$

onde $k = 1, 2, \dots, m$, onde m é o número de iterações. Uma expectativa inicial de $H_0 = 0$ é empregada. O método é finalizado quando o erro estimado fica abaixo de um valor específico de 0,001%. O erro estimado é calculado na equação:

$$\varepsilon_a = \left| \frac{H_{k+1} - H_k}{H_{k+1}} \right| \quad \text{Equação (32)}$$

A área da seção pode ser determinada pela Equação 29 e a velocidade pode então ser determinada pela equação da continuidade:

$$U = \frac{Q}{A_c} \quad \text{Equação (32)}$$

A largura média do elemento, B [m], é computada como:

$$B = \frac{A_c}{H} \quad \text{Equação (33)}$$

A Tabela 2 apresenta valores sugeridos do coeficiente de rugosidade de Manning para diversas superfícies.

Tabela 2 - Coeficiente de rugosidade de Manning (Fonte: Chow, 1959).

Material	n
Canais artificiais	
Concreto	0,012
Fundo de pedra com laterais de	
Concreto	0,020
Pedra coberta com argamassa	0,023
Pedras soltas no leito do canal	0,033
Canais naturais	
Limpo e reto	0,030
Limpo e sinuoso	0,040
Com vegetação, poças e sinuoso	0,050
Com arbustos, madeira	0,100

Valores típicos do coeficiente de Manning (n) variam de acordo com a vazão e profundidade (Gordon *et al*, 1992 *apud* Pelletier *et al*, 2008). Conforme a profundidade diminui em vazões baixas, a rugosidade relativa aumenta. Valores típicos publicados de n , que varia de 0,015 para canais lisos para até 0,15 para canais rugosos naturais, são representativos de condições onde a vazão está no limite de transbordamento da calha do rio (Rosgen, 1996 *apud* Pelletier, 2008). Condições críticas de profundidade para avaliar a qualidade da água são geralmente muito menores que a profundidade de extravasamento, e a rugosidade relativa nesse caso deve ser muito maior.

- *Curvas-chave*

Equações exponenciais podem ser usadas para relacionar a velocidade média e profundidade em vazão:

$$U = aQ^b \quad \text{Equação (34)}$$

$$H = \alpha Q^\beta \quad \text{Equação (35)}$$

onde a , b , α e β são coeficientes empíricos que são determinados das curvas velocidade-vazão e curva-chave, respectivamente. Os valores de velocidade e profundidade são então empregados para determinar a área e largura da seção pelas equações:

$$A_c = \frac{Q}{U} \quad \text{Equação (36)}$$

$$B = \frac{A_c}{H} \quad \text{Equação (37)}$$

Os expoentes b e β possuem valores típicos apresentados na Tabela 3.

Tabela 3 – Valores típicos dos expoentes das curvas-chave usados para determinar a velocidade e profundidade pela vazão (Pelletier *et al*, 2008).

Equação	Expoente	Valor típico	Range
$U = aQ^b$	b	0,43	0,4 – 0,6
$H = \alpha Q^\beta$	β	0,45	0,3 – 0,5

3.5.3. Constituintes do modelo e balanço de massa geral

A Tabela 4 apresenta as variáveis de qualidade de água que podem ser simuladas no QUAL2Kw. Os constituintes que são da coluna d'água são indicados pelo valor "1" subscrito e aqueles com valor "2" são relativos à zona hiporreica, com exceção das algas de fundo na coluna d'água (a_b , IN_b , IP_b) e as bactérias heterotróficas na zona de sedimento hiporreica.

Tabela 4 - Variáveis simuladas no QUAL2Kw.

Variável	Símbolo	Unidade
Condutividade	S_1, S_2	μmhos
Sólidos Inorgânicos Suspensos	$m_{i,1}, m_{i,2}$	mgD/L
Oxigênio Dissolvido	O_1, O_2	mgO_2/L
DBOc lenta	$C_{s,1}, C_{s,2}$	$\text{mg O}_2/\text{L}$
DBOc rápida	$C_{f,1}, C_{f,2}$	$\text{mg O}_2/\text{L}$
Nitrogênio Orgânico	$n_{o,1}, n_{o,2}$	$\mu\text{gN/L}$
Nitrogênio Amoniacal	$n_{a,1}, n_{a,2}$	$\mu\text{gN/L}$
Nitrato	$n_{n,1}, n_{n,2}$	$\mu\text{gN/L}$
Fósforo Orgânico	$p_{o,1}, p_{o,2}$	$\mu\text{gP/L}$
Fósforo Inorgânico	$p_{i,1}, p_{i,2}$	$\mu\text{gP/L}$
Fitoplâncton	$a_{p,1}, a_{p,2}$	$\mu\text{gA/L}$
Detritos	$m_{o,1}, m_{o,2}$	mgD/L
Patógeno	x_1, x_2	$\text{cfu}/100 \text{ mL}$
Alcalinidade	Alk_1, Alk_2	mgCaCO_3/L
Carbono Inorgânico Total	$C_{T,1}, C_{T,2}$	mole/L
Algas inferiores	a_b, a_h	mgA/m^2
Algas inferiores – nitrogênio	IN_b	mgN/m^2
Algas inferiores – fósforo	IN_p	mgP/m^2

A simulação dos constituintes do sedimento da zona hiporreica é opcional no QUAL2Kw, sendo que há três opções:

- Sem simulação da zona hiporreica: as transferências de massa entre a coluna d'água, água intersticial hiporreica e a cinética da qualidade da água da água intersticial hiporreica não são simulados;
- Nível 1: simulação de primeira ordem na oxidação da CDBO rápida com atenuação da CDBO e oxigênio dissolvido do sedimento da zona hiporreica;
- Nível 2: simulação do crescimento do biofilme de bactérias heterotróficas (ordem zero ou primeira ordem), respiração, oxigênio dissolvido, amônia, nitrato e fósforo inorgânico na zona hiporreica intersticial.

Para todas as variáveis, com exceção das algas inferiores, o balanço de massa para um componente em um elemento é definido como (Figura 16):

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} c_{i-1} - \frac{Q_i}{V_i} c_i - \frac{Q_{out,i}}{V_i} c_i + \frac{E'_{i-1}}{V_i} (c_{i-1} - c_i) + \frac{E'_i}{V_i} (c_{i+1} - c_i) + \frac{W_i}{V_i} + S_i \quad \text{Equação (38)}$$

onde W_i é a carga externa do componente no elemento i [g/d ou mg/d], e S_i são as fontes e abstrações do componente devido a reações e mecanismos de transferência de massa [g/m³/d ou mg/m³/d]. A troca de massa entre a superfície da água e a zona de sedimento hiporreica é representada pela troca de vazões no elemento i [$E'_{hyp,i}$ em m³/dia] e pela diferença da concentração na superfície da água (c_i) e da zona de sedimento hiporreica ($c_{2,i}$).

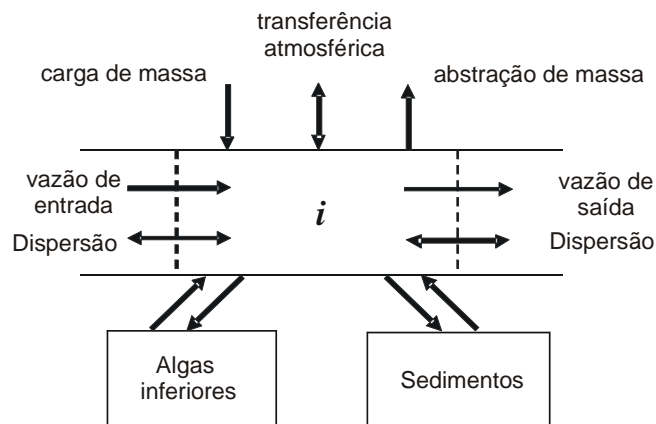


Figura 18 – Balanço de massa (FONTE: Pelletier et al, 2008).

Com exceção do biofilme heterotrófico de bactérias, o balanço de massa geral para um elemento na zona de sedimento hiporreica é escrito como:

$$\frac{dc_{2,i}}{dt} = S_{2,i} + \frac{E'_{hyp,i}}{V_{2,i}} (c_i - c_{2,i}) \quad \text{Equação (39)}$$

onde $S_{2,i}$ = fontes e abstrações do constituinte na zona hiporreica devido a reações, $V_{2,i} = \phi_{s,i} A_{st,i} H_{2,i} / 100$ = volume de água intersticial na zona de sedimento hiporreica [m³], $\phi_{s,i}$ é a porosidade do sedimento da zona hiporreica [adimensional entre 0 e 1], $A_{st,i}$ = área da superfície do trecho [m²], e $H_{2,i}$ = a espessura da zona hiporreica. A porosidade é definida como o volume total de sedimento que está, ao mesmo tempo, na fase líquida e interconectada.

As cargas externas são computadas como:

$$W_i = \sum_{j=1}^{psi} Q_{ps,i,j} c_{psi,j} + \sum_{j=1}^{npsi} Q_{nps,i,j} c_{nps,i,j} \quad \text{Equação (40)}$$

onde $c_{ps,i,j}$ é a j -ésima concentração da fonte pontual no elemento i [mg/L ou µg/L], e $c_{nps,i,j}$ é a j -ésima concentração da fonte difusa no elemento i [mg/L ou µg/L].

Para as algas inferiores, os termos de transporte e carga são omitidos:

$$\frac{da_{b,i}}{dt} = S_{b,i} \quad \text{Equação (41)}$$

$$\frac{dIN_b}{dt} = S_{bN,i} \quad \text{Equação (42)}$$

$$\frac{dIP_b}{dt} = S_{bP,i} \quad \text{Equação (43)}$$

onde $S_{b,i}$ são as fontes e abstrações da biomassa das algas inferiores devido a reações [mgA/m²/d], $S_{bN,i}$ são as fontes e abstrações do nitrogênio das algas inferiores devido a reações [mgN/m²/d], e $S_{bP,i}$ são as fontes e abstrações do fósforo das algas inferiores devido a reações [mgP/m²/d].

Para as bactérias heterotróficas no sedimento da zona hiporreica (opção Nível 2), os termos de transporte e cargas são omitidos:

$$\frac{da_{h,i}}{dt} = S_{ah,i} \quad \text{Equação (44)}$$

onde $S_{ah,i}$ = fontes e abstrações de bactérias heterotróficas na zona de sedimento hiporreica devido às reações [gD/m²/d].

As fontes e abstrações para as variáveis de estado são representadas na Figura 19, com exceção das concentrações internas de nitrogênio e fósforo nas algas inferiores.

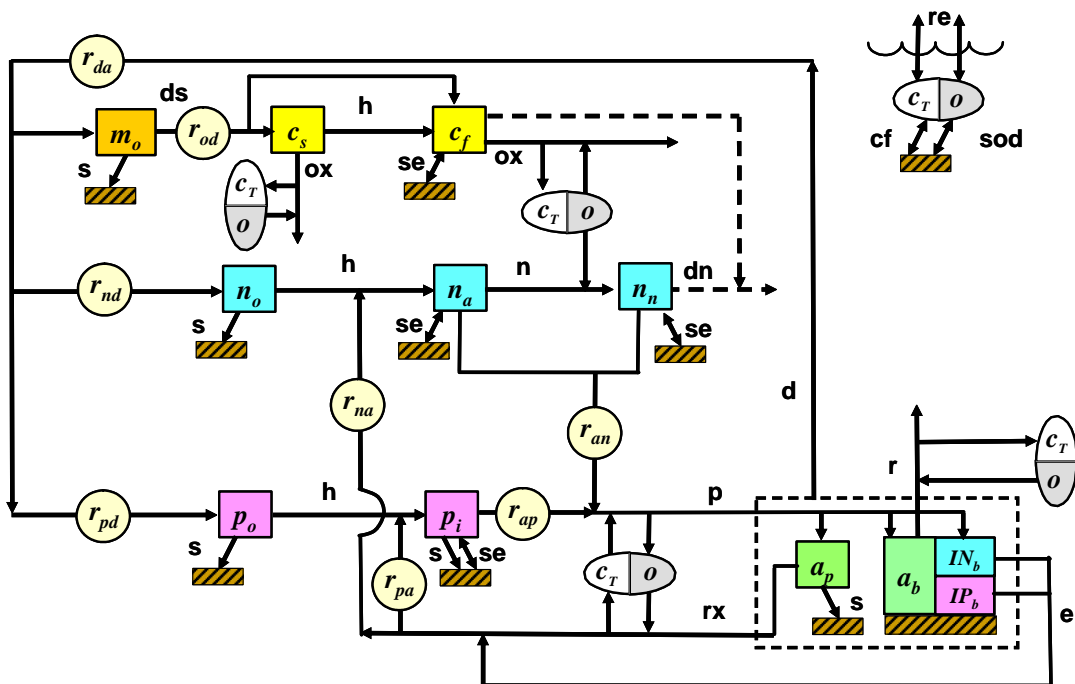


Figura 19 – Cinética do modelo e processos de transferência de massa. As variáveis de estado são definidas na Tabela 4. (FONTE: Pelletier et al, 2008).

Os processos cinéticos são dissolução (ds), hidrólise (h), oxidação (ox), nitrificação (n), desnitrificação (dn), fotossíntese (p), respiração (r), excreção (e), morte (d), respiração/excreção (rx). Os processos de transferência de massa são a reaeração (re), sedimentação (s), demanda de oxigênio do fundo (SOD), transferência de sedimentos e fluxo do carbono inorgânico do sedimento (c_T). Além destas variáveis de estado, o modelo também computa variáveis compostas como o carbono orgânico total, nitrogênio total, fósforo total, nitrogênio Kjeldahl e sólidos suspensos totais que também são incluídas na calibração.

Analisando a Figura 19 pela algas (a_p) e algas de fundo (a_b), verifica-se que ao morrerem (d) geram, via relações estequiométricas (r_{da} , r_{nd} e r_{pd}) detritos, nitrogênio orgânico e fósforo orgânico, respectivamente. Os detritos sofrem dissolução (ds) e sedimentação (s). Após sofrerem dissolução geram DBOClenta (c_s) e, por hidrólise (h), DBOCrápida (c_f), sendo que ambas sofrem oxidação com consumo de oxigênio (o) e geração de gás carbônico (c_T).

O nitrogênio orgânico (n_o) sedimenta e sofre hidrólise, sendo convertido a nitrogênio amoniacal (n_a) que sofre interações com o sedimento (se) e, pelo processo de nitrificação, produz os nitratos (n_n). Estes também sofrem interações com o sedimento e ainda podem passar pela desnitrificação.

O fósforo orgânico (p_o) sedimenta e é convertido a fósforo inorgânico (p_i) por hidrólise, que também sedimenta e sofre interações com o sedimento. A amônia, o nitrato e o fósforo inorgânico são reagentes na fotossíntese (p), onde também há consumo de CO_2 (c_T) e geração de oxigênio.

O modelo ainda assume a respiração das algas (r), com consumo de oxigênio e liberação de gás carbônico, além da excreção (e) que gera fósforo inorgânico e amônia. Oxigênio e gás carbônico ainda sofrem influência da reaeração e demanda (SOD) e fluxo do sedimento (c_f).

No anexo A é apresentado o manual do QUAL2Kw onde são definidas as formas como as reações, os processos químicos e físicos são modelados.

3.5.4. PIKAIA - algoritmo genético de autocalibração do QUAL2Kw

O PIKAIA é o algoritmo genético usado no QUAL2Kw como ferramenta para a otimização de seu processo de calibração, sendo desenvolvido por Charbonneau (1995) para a solução de diversos problemas nas áreas da astrofísica e astronomia. O fluxograma deste AG é apresentado na Figura 20.

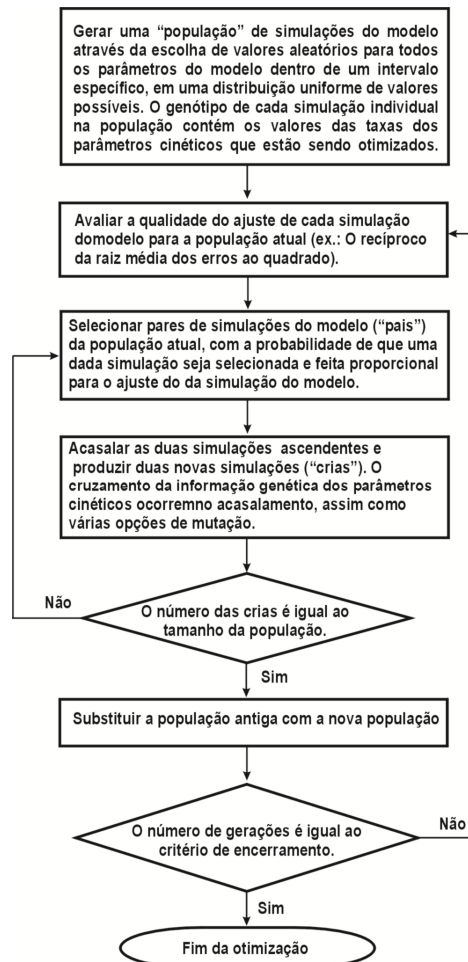


Figura 20 – Fluxograma do algoritmo genético utilizado no QUAL2Kw (adaptado de Pelletier *et al*, 2006).

O PIKAIA tem por objetivo maximizar uma função-objetivo $f(x)$. Os parâmetros cinéticos (x) são relacionados no algoritmo em uma escala de 0,0 a 1,0. Estes são sequenciados pelos valores de x de acordo com uma interpolação linear entre os valores mínimo e máximo, especificados pelo usuário, para cada parâmetro cinético a ser otimizado. O valor da função-objetivo $f(x)$, que rege a maximização realizada pelo algoritmo genético (AG), corresponde à aptidão, ou adequação, de determinada simulação para os parâmetros sequenciados em questão.

Na aba "RATES" do QUAL2kw é possível especificar os parâmetros que serão autocalibrados ou inseridos pelo usuário, com seus respectivos intervalos de valores mínimos e máximos.

A maximização do melhor ajuste entre a simulação e os dados medidos em campo é feita através do índice RMEQ (Equação 45), ou seja, pela menor diferença entre as previsões do modelo e os dados observados para os diferentes parâmetros a serem analisados (Kannel *et al*, 2007). O programa necessita de uma fórmula de ajuste em que conforme seu resultado aumente o valor do ajuste também aumente.

Uma vez que a RMEQ diminui conforme o ajuste melhora, Pelletier *et al* (2008) sugere o uso do inverso da RMEQ, uma vez que esta razão será maior junto com a qualidade do ajuste.

Assim, a função-objetivo $f(x)$, conforme apresentada na Equação 45, é capaz de representar todas as variáveis do modelo e atenderá às condições impostas pelo PIKAIA:

$$f(x) = \left[\sum_{i=1}^q w_i \right] \left[\sum_{i=1}^q \frac{1}{w_i} \right] \frac{\left[\frac{\sum_{j=1}^m O_{ij}}{m} \right]}{\left[\frac{\sum_{j=1}^m (P_{ij} - O_{ij})^2}{m} \right]^{\frac{1}{2}}} \quad \text{Equação (45)}$$

Onde:

O_{ij} = valores observados;

P_{ij} = valores simulados;

m = número de pares de valores observados e simulados;

w_i = fator de ponderação, onde é possível priorizar algumas variáveis em detrimento de outras;

q = número de parâmetros simulados.

Na aba "FITNESS" do QUAL2Kw o usuário pode estruturar a função objetivo mais conveniente, desde que seu valor aumente com a qualidade do ajuste. Para tal, deve-se lançar os valores observados e os valores calculados e posteriormente igualar a célula G3 na aba "RATES" à célula que apresente o resultado da fórmula da Equação 45 na aba "FITNESS".

A Tabela 5 apresenta onde são lançados os coeficientes do PIKAIA.

Tabela 5 – Coeficientes do PIKAIA na aba “RATES” do QUAL2Kw.

<i>Auto-calibration genetic algorithm control:</i>		
Random number seed	123456	seed
Model runs in a population (<=512)	100	np
Generations in the evolution	50	ngen
Digits to encode genotype (<=6)	5	nd
Crossover mode (1, 2, 3, 4, 5, 6, or 7)	3	icross
Crossover probability (0-1):	0,85	pcross
Mutation mode (1, 2, 3, 4, 5, or 6)	2	imut
Initial mutation rate (0-1):	0,005	pmut
Minimum mutation rate (0-1):	0,0005	pmutmn
Maximum mutation rate (0-1):	0,25	pmutmx
Relative fitness differential (0-1):	1	fdif
Reproduction plan (1, 2, or 3):	1	irep
Elitism (0 or 1):	1	ielite
Restart from previous evolution (0 or 1):	0	irestart

Onde:

seed: qualquer valor inteiro pode ser lançado como uma semente para a geração de números aleatórios;

np: número de simulações em uma população (valor default é 100);

ngen: número de gerações da evolução, sendo que este é o número de gerações onde cada solução para a calibração automática está a evoluir (default é 50);

nd: número de dígitos para codificar o genótipo, ou seja, o número de dígitos significativos (ou número de genes) retidos na codificação cromossômica (default é 5);

icross: modo de cruzamento (default é 3);

pcross: probabilidade de cruzamento. Se o cruzamento ocorre, um ou dois pontos de união são usados com probabilidades iguais (deve ser menor ou igual a 1,0, sendo o default 0,85);

imut: modo de mutação (default é 2);

pmut: taxa de mutação inicial e deve ser pequeno. A pmut é a probabilidade que qualquer dos genes irão sofrer mutações em qualquer geração (default é 0,005);

pmutmn: deve ser maior e igual a zero (default é 0,0005);

pmutm: deve ser menor ou igual a 1,0 (default é 0,25);

fdif: varia de 0 a 1, sendo default igual a 1

irep: plano de reprodução, onde 1 é o substituição total das gerações; 2 é o substituição aleatória constante; 3 é o substituição constante que descarta as piores crias (default é 1);

ielite: 1 é ligado e 0 é desligado, sendo aplicado somente nos planos de reprodução 1 e 2 (default é 0)

irestart: reinício da evolução anterior, onde 0 são valores aleatórios iniciais; 1 é o uso da última geração da simulação anterior para a população inicial (default é 0).

Dessa maneira, supondo-se que em uma determinada situação seja necessária a calibração de n parâmetros, sendo p_i cada parâmetro, e que cada vetor cromossomo qualquer (C_n) representa um conjunto de parâmetros e cada gene um parâmetro, tem-se:

$$C_n = [p_1; p_2; p_3; p_4; p_5; \dots; p_{100}]$$

sendo que cada gene (ou parâmetro) tem valores mínimos e máximos previamente definidos.

Conforme os operadores genéticos (cruzamento, mutação, elitismo) são inseridos no programa, o PIKAIA irá realizar essas operações e salvar aquelas combinações de cromossomos cujos genes que geraram um melhor ajuste na função objetivo. Esses cromossomos são cruzados iterativamente até que se atinja o critério de parada, ou seja, o número de gerações previamente definido. A última geração é aquela que apresenta o melhor ajuste.

Portanto, o tempo de simulação para a autocalibração é determinado pelo número de vezes que o modelo é executado dentro de uma população (np) e o número de

gerações (ngen), sendo o número de rodadas do QUAL2Kw será pelo menos $np*(ngen+1)$ vezes.

3.5.5. Configuração do QUAL2Kw

O modelo QUAL2Kw versão 5.1 é implementado no ambiente Microsoft Windows® e usa o Excel como interface gráfica, sendo que o programa está escrito em FORTRAN 95. Assim, o usuário insere e edita os dados numa planilha e então o programa executável em linguagem computacional escreve os resultados em outras planilhas e gráficos em diferentes abas no mesmo arquivo Excel do programa original.

	A	B	C
1	QUAL2Kw (version 5.1)		
2	Stream Water Quality Model	Open File	Run VBA
3	Greg Pelletier, Steve Chapra, and Hua Tao		Run Fortran
4	Department of Ecology and Tufts University		
5			
6			
7	System ID:		
8	River name		ITAPANHAU
9	Saved file name		ITA
10	Directory where the input/output files are saved		
11	Month		11
12	Day		5
13	Year		2009
14	Time zone		-1
15	Daylight savings time		No
16	Simulation and output options:		
17	Calculation step		10 minutes
18	Number of days		20 days
19	Solution method (integration)		Euler
20	Solution method (pH)		Newton-Raphson
21	Simulate hyporheic exchange and pore water quality		Level 2
22	Display dynamic diel output		No
23	State variables for simulation		All
24	Simulate sediment diagenesis		No
25	Simulate alkalinity change due to nutrient change		No
26	Program determined calc step		5,625 minutes
27	Time elapsed during last model run		33,35 minutes
28	Time of sunrise		8:12 AM
29	Time of solar noon		1:47 PM
30	Time of sunset		7:22 PM
31	Photoperiod		11,16 hours

Figura 21 – Interface gráfica do usuário no QUAL2Kw.

3.6. Fundamentos teóricos do mecanismo das marés

O mecanismo de formação das ondas de maré é complexo, sendo em primeira análise, relacionado ao movimento do sistema terra-sol-lua. Nas regiões de estuários, a onda de maré apresenta oscilações de alta frequência em função da topo-batimetria local, descarga fluvial e dissipação de energia devido aos atritos no fundo e margens do estuário. Desta forma, a onda de maré num estuário pode ser consideravelmente deformada (Martins, 2008).

A interação entre a onda de maré e as margens é responsável pela alteração das alturas de maré e velocidades das correntes. A convergência das margens do estuário, no sentido externo-interno, provoca a compressão da onda de maré e, na ausência de atrito, provoca o aumento da altura de água. Quando o atrito é importante, ocorre a redução das cotas máximas atingidas.

A análise dos fenômenos de maré é feita a partir da decomposição das alturas em componentes harmônicos a partir da análise espectral (Franco, 1998 *apud* Martins, 2008) e as principais componentes são relacionadas ao movimento diurno do sol e da lua, sendo denominadas de componentes 'diurnas e semi-diurnas'. Estas respondem por mais de 80% da amplitude total da maré. No caso dos estuários, as componentes de águas rasas também aparecem, como harmônicos combinados das componentes M2, S2 e N2.

$$H_m = H_{\text{médio}} + \sum_1^n N_{i,\text{ano}} \cdot a_i \cos(w_i \cdot t + E_{i,\text{ano}} - F_i) \quad \text{Equação (46)}$$

onde

$H_{\text{médio}}$ é o nível de referência considerado

$N_{i,\text{ano}}$ é o fator de correção da amplitude da componente i , para o ano

$E_{i,\text{ano}}$ é o fator de correção da fase da componente i , para o ano

a_i é a amplitude da componente i

F_i é a fase da componente i

Tabela 6 - Principais componentes da maré na costa brasileira (Martins, 2008).

Período	Componente	Velocidade (°/hora)
Diurno	O ₁	13,943
	K ₁	28,440
	Q ₁	57,424
Semi Diurno	M ₂	28,984
	S ₂	30,000
	N ₂	58,984
	T ₂	57,968
	MS ₄	58,984
Águas Rasas	M ₄	57,968
	M ₃	43,476

A determinação das constantes harmônicas a partir de observações de campo pode ser feita através de diferentes métodos, destacando-se entre eles o que emprega a 'transformada rápida de Fourier - FFT', o método dos mínimos quadrados e o método da correlação (Martins, 2008).

3.7. O aplicativo CLIV para a determinação da linha d'água em escoamentos transitórios

O CLIV é um aplicativo para cálculo do escoamento em canais e condutos funcionando a superfície livre, sendo que os processos matemáticos empregados permitem a simulação dos escoamentos permanentes gradualmente variados (linha d'água) e dos escoamentos transitórios (<http://www.dae.sp.gov.br>).

Para o escoamento permanente aplica-se um modelo numérico derivado da Equação da Quantidade de Movimento (Equação 48) que permite a solução do cálculo da linha d'água para canais de qualquer geometria. Tal equação, juntamente com a Equação da Continuidade (Equação 48), também são conhecidas como Equações de Saint-Venant (Tucci *et al*, 1998):

$$\frac{\partial A}{\partial x} + B \frac{\partial y}{\partial t} = q \quad \text{Equação (47)}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{Q^2}{A} \right) + gA \frac{dh}{dx} + gAS_f = q v \cos \gamma \quad \text{Equação (48)}$$

Onde:

- x : coordenada longitudinal
- t : tempo
- Q : Vazão líquida
- y : Cota do nível d'água
- p : Perímetro molhado
- A : Área molhada
- B : Largura à superfície livre
- b : Coeficiente de Quantidade de Movimento
- q : Vazão líquida de contribuição lateral específica
- S_f : Inclinação da linha de energia
- v : Velocidade da contribuição lateral líquida
- γ : Ângulo da contribuição lateral com o eixo do canal

A Figura 22 indica o significado físico das variáveis relacionadas.

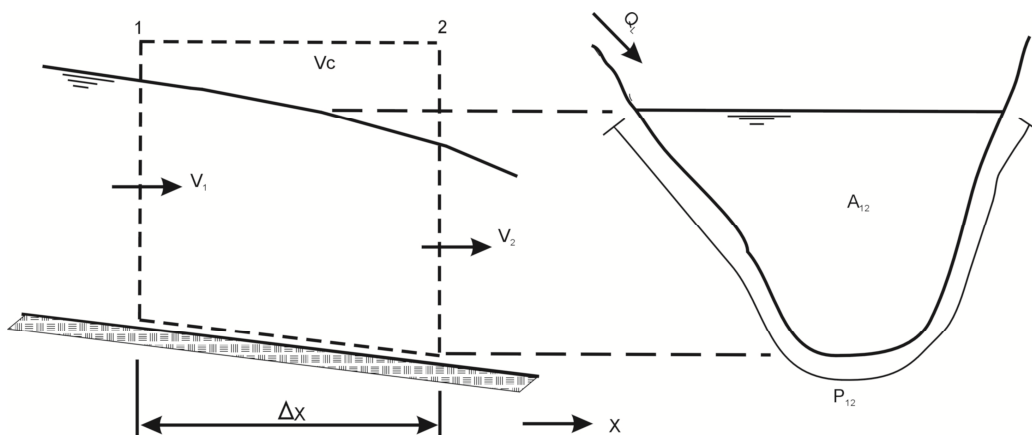


Figura 22 – Significado físico das variáveis das Equações de Saint-Venant (Martins¹, 2008).

O parâmetro S_f representa as perdas de energia, usualmente calculadas pela equação de Chézy, da forma:

$$S_f = \frac{Q^2}{C^2 A^2 R_h} \quad \text{Equação (49)}$$

onde o termo C é uma das formas de definição do parâmetro de resistência ao escoamento:

$$\frac{c}{\sqrt{g}} = \sqrt{\frac{8}{f}} = \frac{U}{u^*} = \frac{1}{n} \frac{\sqrt[6]{R_h}}{\sqrt{g}} \quad \text{Equação (50)}$$

A Equação 48 pode ser reescrita da forma:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{Q^2 \partial \beta}{A \partial x} + 2\beta \frac{Q \partial \beta}{A \partial x} + gA(1 - \beta F^2) \frac{\partial y}{\partial x} - \beta \frac{Q^2 \partial A}{A^2 \partial x|_{y=\text{const}}} + gAS_f = q v \cos \gamma \quad \text{Equação (51)}$$

onde

$$F^2 = \frac{Q^2 B}{gA^3} \quad \text{Equação (52)}$$

é o quadrado do número de Froude do escoamento.

O cálculo do escoamento permanente e sem contribuições laterais com quantidade de movimento é dado por:

$$2\beta \frac{Q}{A} q + gA(1 - \beta F_r^2) \frac{\partial y}{\partial x} + gAS_f = 0 \quad \text{Equação (53)}$$

Entretanto, os escoamentos não permanentes têm como característica a variabilidade dos parâmetros no tempo e no espaço conjuntamente. É a situação genérica do escoamento dos cursos d'água naturais em regime de cheias (Martins¹, 2008).

O CLIV realiza o cálculo de transitórios através dos modelos Preissmann e McCormack, sendo que no primeiro é utilizado o método das diferenças finitas implícito onde é adotado um esquema de discretização temporal e espacial das grandezas envolvidas (Silva, 2006). Fadiga (1991) apresenta uma descrição detalhada do CLIV e dos cálculos de linha d'água.

4. METODOLOGIA

4.1. Área de estudo

A Bacia do Rio Itapanhaú está localizada na região Centro-Leste do Estado de São Paulo, fazendo parte da Bacia da Baixada Santista (UGRHI 7). Possui uma área de 149km² na exultória em 23°45'24S e 46° 3'7"O, abrangendo quatro municípios: Bertioga, Biritiba-Mirim, Mogi das Cruzes e Salesópolis.



Figura 23 – Localização da Bacia da Baixada Santista (UGRHI 7) no estado de São Paulo.

A Figura 24 apresenta o traçado da Bacia do Itapanhaú, com exultória em 23°45'24"S e 46° 3'7"O, através da junção das cartas IBGE MI-2795-1/3, MI-2794-2 e MI-2794-4. Na Figura 25 tem-se uma aproximação com o detalhamento da formação do Rio Itapanhaú e a identificação dos pontos de amostragem.

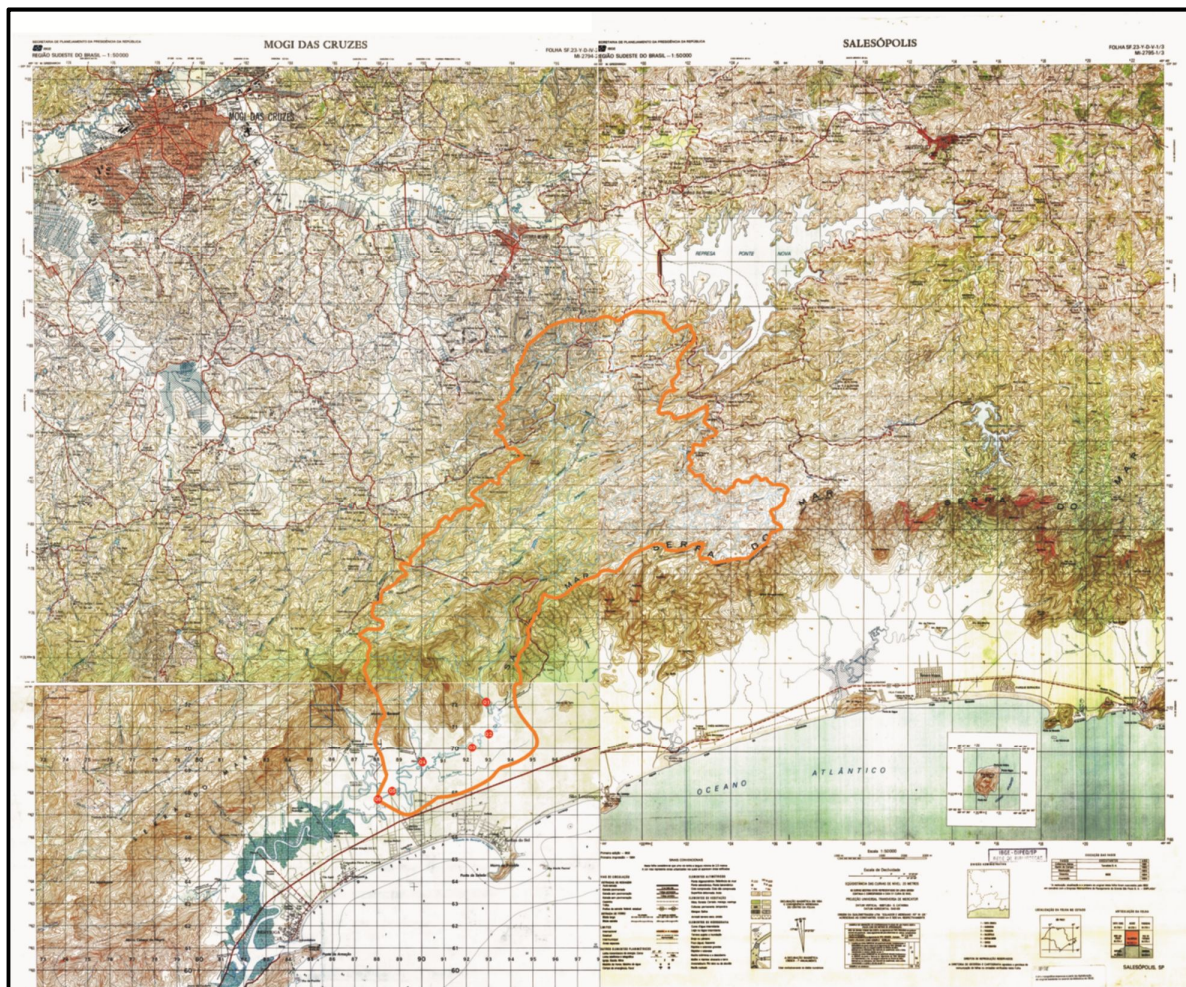


Figura 24 – Localização e traçado da Bacia do Rio Itapanhaú com exultória em 23°45'24"S e 46° 3'7"O através das Cartas IBGE de Salesópolis, Mogi das Cruzes e Bertiooga (MI-2795-1/3, MI-2794-2 e MI-2794-4).

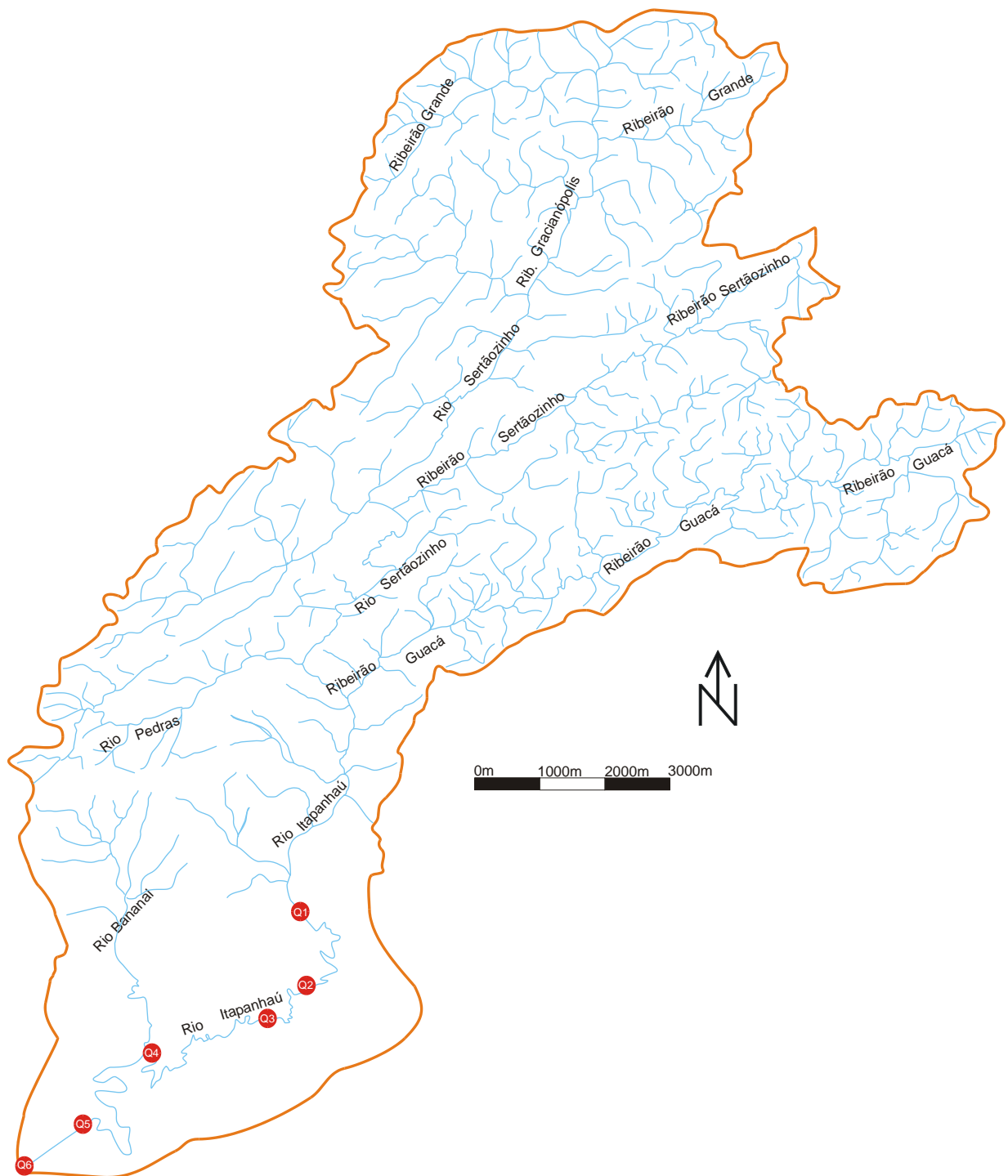


Figura 25 – Traçado da parcela de interesse da bacia do Rio Itapanhaú com os rios e a identificação dos pontos de amostragem de qualidade de água.

Diferentemente da população de Bertioga inserida na porção da planície litorânea da bacia do Itapanhaú, a população dos municípios de Mogi das Cruzes, Biritiba-Mirim e Salesópolis residente na parte do planalto dessa área de drenagem é basicamente rural, como é possível visualizar nas imagens da Figura 26. A parcela da área de grandes declividades é praticamente inabitada e constitui parte do Parque Estadual da Serra do Mar.

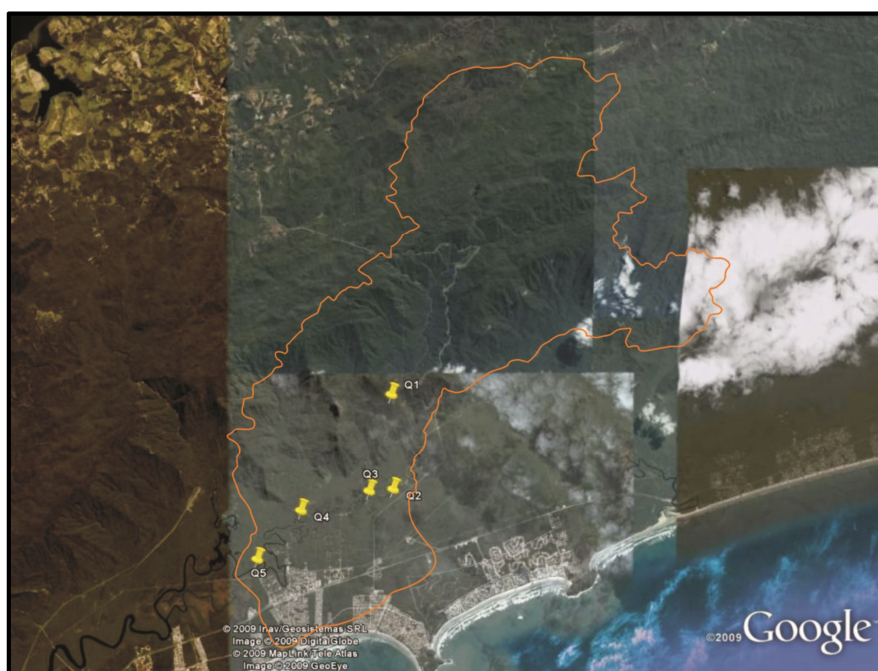


Figura 26 – Foto de satélite da região em estudo (Fonte: Google Earth).

De acordo com o Relatório do Comitê da Bacia da Baixada Santista (2007), a temperatura média anual da região é superior a 24° C e a média das mínimas, em julho, ultrapassa a 16°C; na encosta da Serra do Mar, a temperatura média anual oscila entre 20° C e 24° C e a média das mínimas entre 8° C e 10° C, podendo em determinadas ocasiões atingir 0° C.

Ainda conforme esse relatório, a Bacia do Rio Itapanhaú é basicamente composta pela Mata Natural ou Nativa (Floresta Ombrófila Densa) que constitui uma vegetação muito densa e exuberante, predominante na bacia, distribuindo-se ao longo das encostas da porção serrana, a partir de alguns metros de altitude, até mais de 1.000m

acima do nível do mar. A Floresta Ombrófila Densa possui uma enorme variação de composição da flora, conferindo-lhe uma elevada biodiversidade devida a elevada pluviosidade. Ademais, a vegetação de Restinga desenvolve-se sobre os sedimentos marinhos recentes da Baixada, sendo considerada também como comunidade edáfica, pois depende mais da natureza do solo do que do clima. É caracterizada pelo estrato herbáceo, arbustivo e arbóreo, este último mais interiorizado. Seu desenvolvimento é condicionado pelo nível do lençol freático, pelo tipo de solo, pela proximidade do mar e pelos efeitos do vento marinho.

Adicionalmente, o substrato geológico da região é composto por grande variedade litológica, agrupada genericamente em dois grupos com características distintas: as rochas do embasamento cristalino e as coberturas cenozóicas, correspondente a faixa litorânea. Os dados sobre geologia são de fundamental importância para a bacia, pois apresentam relação direta com os aquíferos existentes.

Em relação à pluviosidade, a zona contígua à cabeceira do Rio Itapanhaú chega a ter o maior índice pluviométrico do Brasil, tendo uma média anual de 4.600 mm. O alto índice pluviométrico deve-se principalmente ao efeito das feições topográficas do relevo sobre a circulação atmosférica da região. Por ser uma área cercada de montanhas e muito próxima do oceano, os ventos carregados de umidade são barrados pelas montanhas costeiras e se elevam. Devido a esta elevação, ocorre um resfriamento do ar e o vapor de água em excesso se precipita sob a forma de chuva ou nevoeiro (Silva Filho, 1988 *apud* Pinto, 2000).

A região possui um ano hidrológico que inicia em outubro, onde também se inicia a estação úmida que vai até abril, sendo a estação seca compreendida entre os meses de maio e setembro. Na Figura 27, a partir de dados diários coletados parcialmente consistidos do posto E3-106 do DAEE, de maio de 1948 a abril de 2001, apresentam-se as médias mensais de chuva acumulada em mm/m². É importante salientar que os dados dessa estação apresentaram muitas falhas em novembro, razão pela qual o volume médio de chuva apresentou-se menor que a média.

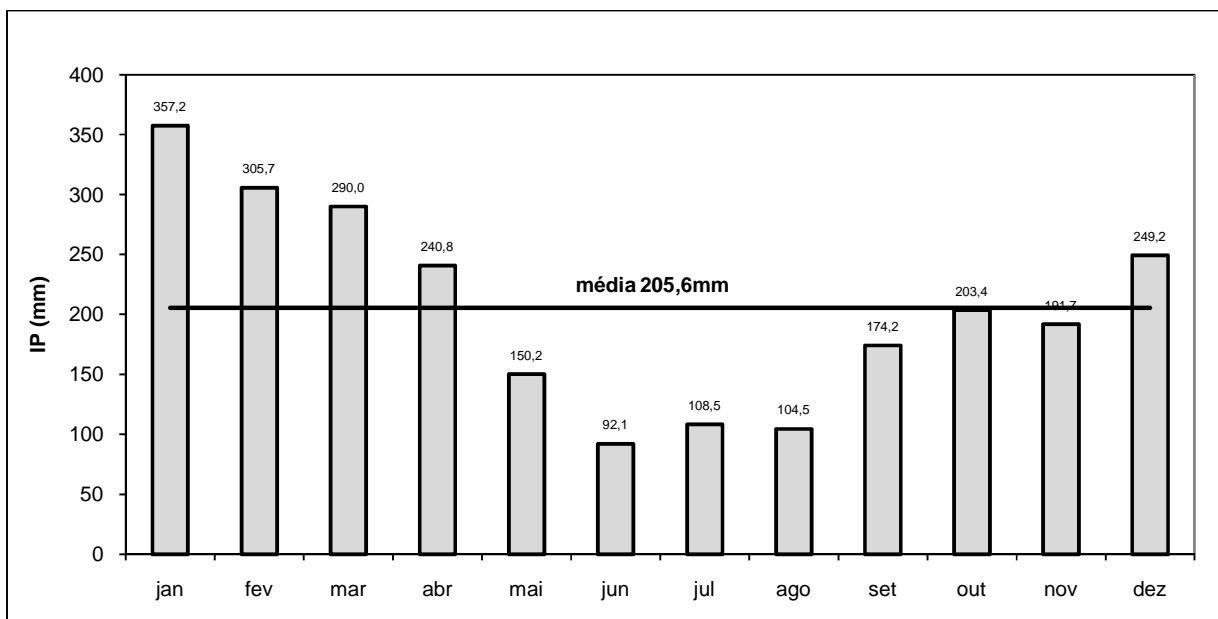


Figura 27 – Chuva média mensal no período de maio de 1948 a abril de 2001 registrada pelo Posto E3-106 do DAEE, nas coordenadas 23°51' S e 46°08'.

Em relação à ocupação, segundo dados da CETESB (2007), o município de Bertioga possui 51.080 habitantes sendo 50.145 na área urbana. A coleta de esgotos abrange 34% da população, sendo que todo o esgoto coletado é tratado por uma ETE Lodos Ativados pela SABESP, onde o Rio Itapanhaú é o corpo receptor, além de alguns loteamentos que possuem ETE's próprias.

É importante salientar que não foram encontrados na literatura estudos específicos de qualidade de água e dispersão nesse trecho do Rio Itapanhaú.

4.2. Amostragem e dados a serem simulados

A Figura 28 apresenta os pontos de amostragem no Rio Itapanhaú (Q1, Q2, Q3, Q4 e Q5) e dois lançamentos (L1, uma ETE de um loteamento e L2, o Rio Bananal).

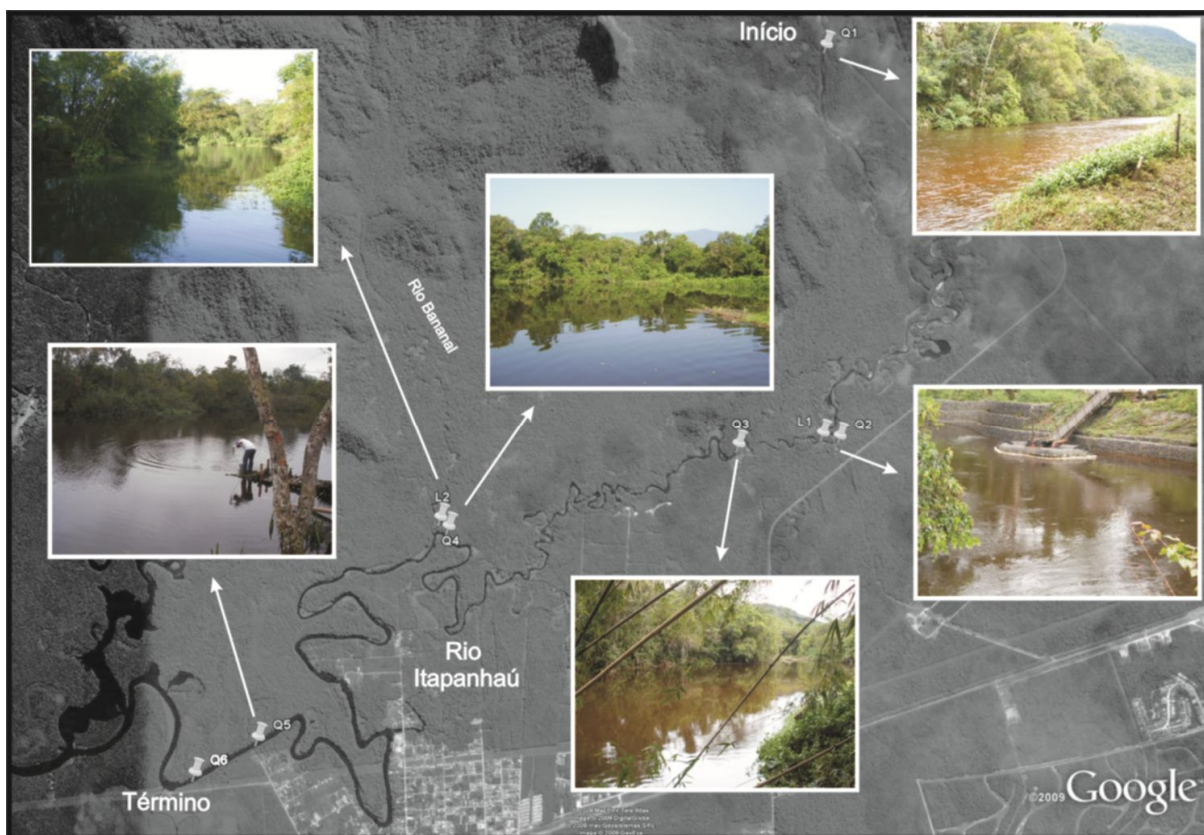


Figura 28 – Identificação e fotos do trecho do rio em relação aos pontos amostrados.

A Tabela 7 apresenta as coordenadas de cada ponto de amostragem, sendo que na Tabela 8 são relacionadas as variáveis de qualidade de água medidas em laboratório.

Tabela 7 – Localização e identificação dos pontos amostrados.

PONTO	LOCALIZAÇÃO	COORDENADAS	
Q1	Junto ao início da Serra do Mar	23°45'03.11"S	46° 03'14.52"O
Q2	Junto às captações da SABESP e loteamento	23°46'36.54"S	46° 03'12.60"O
Q3	800m a jusante do lançamento do loteamento	23°46'38.38"S	46° 03'38.21"O
Q4	100m a montante do encontro do Rio Bananal no Rio Itapanhaú	23°46'57.41"S	46° 4'51.28"O
Q5	Junto ao término da Rua Aprovada 597 no Bairro de Vista Linda	23°47'45.12"S	46° 5'38.01"O
L1	Lançamento do efluente tratado do loteamento	23°46'35.80"S	46° 3'16.84"O
L2	Rio Bananal	23°46'55.33"S	46° 4'53.35"O

Tabela 8 – Variáveis de qualidade de água medidas dos pontos amostrados.

Variável	Unidade	Método	Referência Bibliográfica
Alcalinidade	mgCaCO ₃ /L	Titulométrico	APHA (2005), 2320B
Condutividade	µS/cm	Potenciométrico	APHA (2005), 2510
Clorofila	µg/L	Determinação de Pigmentos Fotossintetizantes Clorofila-A, B e C e Feofitina-A	L5 – 306/CETESB 12/90
DBO	mgO ₂ /L	Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) – Método da diluição e incubação (20° C, 5 dias)	L5 – 120/CETESB 10/91
Fosfato	mgPO ₄ ³⁻ /L	Espectrofotométrico com o kit 8190 DR 5000/HACH	HACH (2008)
Fósforo Total	mgP/L	Espectrofotométrico com o kit 8190 DR 5000/HACH	HACH (2008)
Nitrogênio Amoniacal	mgNH ₃ /L	Espectrofotométrico com o kit 10023 DR 5000/HACH	HACH (2008)
Nitrato	mgNO ₃ /L	Espectrofotométrico com o kit 10020 DR 5000/HACH	HACH (2008)
Nitrito	mgNO ₂ /L	Espectrofotométrico com o kit 10019 DR 5000/HACH	HACH (2008)
Nitrogênio Total	mgN/L	Espectrofotométrico com o kit 10072 DR 5000/HACH	HACH (2008)
Oxigênio Dissolvido	mgO ₂ /L	Determinação de Oxigênio Dissolvido em águas – Método de Winckler modificado pela Azida sódica	L5 – 169/CETESB 01/78
pH	-	Potenciométrico	APHA (2005), 4500 H ⁺
Sólidos	mg/L	Método Gravimétrico	APHA (2005), 2540
Temperatura	°C	Potenciométrico	-

O ponto Q1 é um trecho do Rio Itapanhaú bem preservado, sendo inclusive explorado pelo ecoturismo. No ponto Q2 têm-se as captações da SABESP que atende parte do município de Bertoga e de um loteamento de alto padrão no mesmo município. O trecho compreendido entre esses pontos fora explorado por empresas de aterro até o fim da década de 90, sendo que hoje essa atividade foi proibida na região.



Figura 29 – Ponto Q1 (a) e Q2 (b, onde estão as duas captações).

A 700m a montante do ponto Q3 têm-se o lançamento da ETE (L1) de um loteamento com uma outorga de 800m³/h por 24h/dia. É um trecho também preservado, sendo que a margem direita explorada por pequenas plantações de banana para subsistência.



Figura 30 – Fotos do ponto Q3, trecho ainda bem preservado do Rio Itapanhá.

Entretanto, nas proximidades dos pontos Q4 e, principalmente, Q5, é possível a identificação de sub-habitações sem algum tipo de coleta e tratamento de esgotos, com muitas destas instaladas na margem esquerda do rio. Existe ainda um comércio de hospedagem e locação de pequenas embarcações, captura e venda de camarão vivo em função da pesca do robalo, usualmente entre os meses de novembro a março.



Figura 31 – Fotos dos pontos Q4 (a e b, onde é possível identificar a mata ciliar preservada e resquícios das instalações de antigos portos de areia) e Q5 (c e d presença de sub-habitações).

O Rio Bananal (identificado como ponto L2) é um rio cuja bacia apresenta-se preservada, com baixíssimo índice de ocupação. As águas desse corpo hídrico são geralmente cristalinas na ausência de chuvas, sendo um potencial manancial para a região.

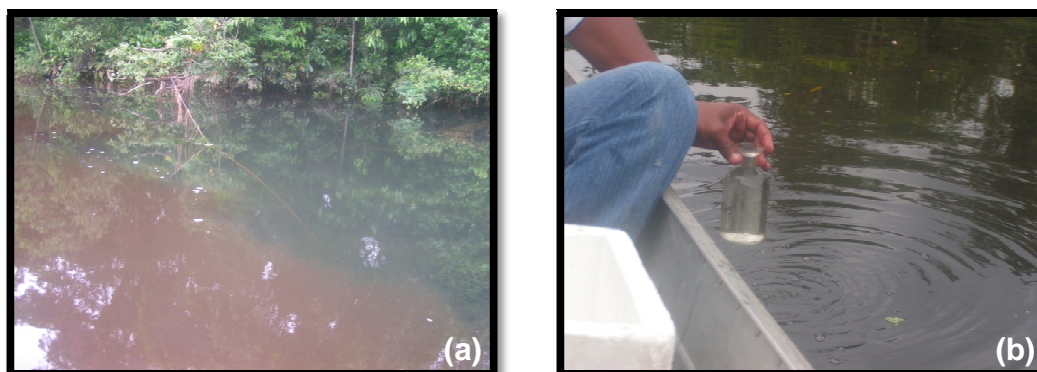


Figura 32 – Encontro das águas dos rios Bananal e Itapanhaú (a) e coleta de amostra para DBO e OD no Rio Bananal (b).

Todas as análises foram realizadas em laboratório, com exceção da condutividade que foi medida *in situ* através de um condutivímetro HANNA PWT, com sensibilidade de 0,1µS, e temperatura, através de um termômetro de campo GULTERM200, ambos previamente calibrados. No momento das coletas os frascos foram lavados com a própria água do ponto amostrado, sendo posteriormente preservadas em frascos adequados (como o frasco da DBO e o de coliformes), sendo devidamente preservadas em caixas térmicas a aproximadamente 4°C, conforme CETESB (1998). O OD foi fixado com 2mL de sulfato manganoso 2mL de azida sódica *in situ*, conforme o Método de Winkler. Todas as amostras entraram em processo de análise no mesmo dia, não havendo preservação para análise em dias posteriores.

O pH foi medido através de um peagâmetro de bancada DIGIMED DMPH-2; nitrogênio total, amônia, nitrato, nitrito, fósforo total e fosfato foram medidos em um espectrofotômetro HACH DR5000, com comprimentos de onda de 410, 655, 410, 507, 880, 880 e respectivamente. O nitrogênio orgânico foi determinado pela subtração entre o nitrogênio total e a soma da amônia, nitrato e nitrito, conforme estudos realizado por Guedes (2009) e Turner *et al* (2008). O fósforo orgânico também foi obtido pela subtração entre o fósforo total e o fosfato inorgânico.

O método utilizado para determinação de clorofila foi baseado em APHA (2005) e CETESB L5/306 (1990). As amostras foram coletadas em frascos âmbar, sendo filtradas em laboratório a vácuo um volume de 100 a 500mL. Após a secagem do filtro com a amostra os mesmos foram colocados em um almofariz, sendo adicionado 5mL de solução de acetona 90% e macerado. As amostras maceradas são transferidas para um tubo de centrífuga e ajustado o volume para 10mL. Os tubos são envolvidos em papel alumínio e submetidos a 4°C por no mínimo duas horas, e posteriormente centrifugados durante 20 minutos a 2600 a 3000 rpm. O sobrenadante é transferido para um tubo de ensaio com tampa envolvido em papel alumínio. A última etapa consiste na leitura espectrofotométrica antes e após acidificação com 0,1mL de ácido clorídrico 0,1N, sendo duas leituras realizadas a 664 e 750nm antes e após 665 e 750nm a acidificação. A clorofila-a é determinada pela Equação:

$$\text{Clorofila} - a (\mu\text{g/L}) = \frac{26,7 * (\text{leitura_antes} - \text{leitura_após}) * \text{Volume do extrato (mL)}}{\text{Volume da amostra (L)}} \quad \text{Equação (54)}$$

Em relação ao OD, a partir da amostra preservada adiciona-se 2mL de fluoreto de sódio e 2mL de ácido sulfúrico concentrado. A amostra é tampada e agitada para a dissolução do precipitado, sendo transferido 100mL para um Erlenmeyer de 250mL e titulado com solução de tiosulfato de sódio a 0,0125N até a coloração amarelo-claro. Adiciona-se 2mL de amido e procede-se com a titulação até a viragem da cor azul para incolor. O OD é determinado a partir de uma relação entre o volume gasto de tiosulfato de sódio e o fator da solução desse sal.

A DBO para águas limpas (todos os pontos com exceção do ponto L1) foi determinada pelo método A da norma CETESB L5-120 (1991), a partir da diferença entre o OD inicial e o OD após um período de 5 dias na incubadora de DBO a 20°C. Já a DBO da amostra do ponto L2 foi determinada a partir dos métodos B e C da norma citada. Para realizar a inibição da nitrificação foi adicionado 0,16g de TCMP (2-cloro-6-triclorometil-piridina) para cada 300mL de amostra.

Os sólidos foram determinados pelo método gravimétrico, onde fora filtrado um volume conhecido da amostra e esse filtrado submetido à temperatura de 103°C por 1 hora em estufa. Após esse procedimento, transferiu-se a amostra para um dessecador por um período de tempo necessário para o resfriamento. Realizou-se a pesagem determinado-se os sólidos suspensos totais. Para a determinação dos sólidos suspensos fixos, submeteu-se as amostras a uma mufla a 550°C por 15 minutos, transferindo-se as amostras para um dessecador para resfriamento. A diferença entre os sólidos suspensos totais e sólidos suspensos fixos são os sólidos suspensos voláteis. As Figuras 34 a 36 ilustram algumas das atividades de análises e de campo e laboratoriais desenvolvidas.

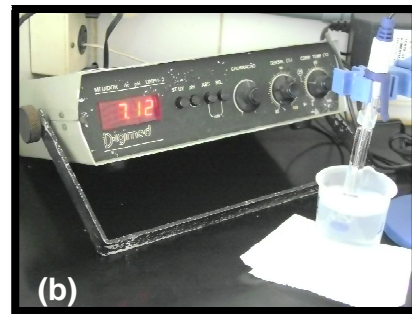


Figura 33 – Foto do frasco do inibidor de nitrificação (a) e peagâmetro (b)



Figura 34 – Condutivímetro HANNA PWT (a) e espectrofotômetro HACH DR5000 (b).



Figura 35 – Fixação do oxigênio (a); equipamentos de coleta e preservação de amostra (b); frascos contendo amostras para análises (c).

Foram realizadas 3 campanhas de medição de dados de qualidade de água: 01/10/2009, 05/11/2009 e 17/12/2009

4.3. Definição das condições hidrodinâmicas e hidrológicas

Os gráficos das Figuras 36 e 37 apresentam, respectivamente, os registros de nível d'água e vazão do Rio Itapanhaú nos pontos Q1 e Q3 de novembro de 2006 a março de 2008. A variância no nível d'água do ponto Q3 é 0,152, enquanto que no ponto Q1 é 0,047.

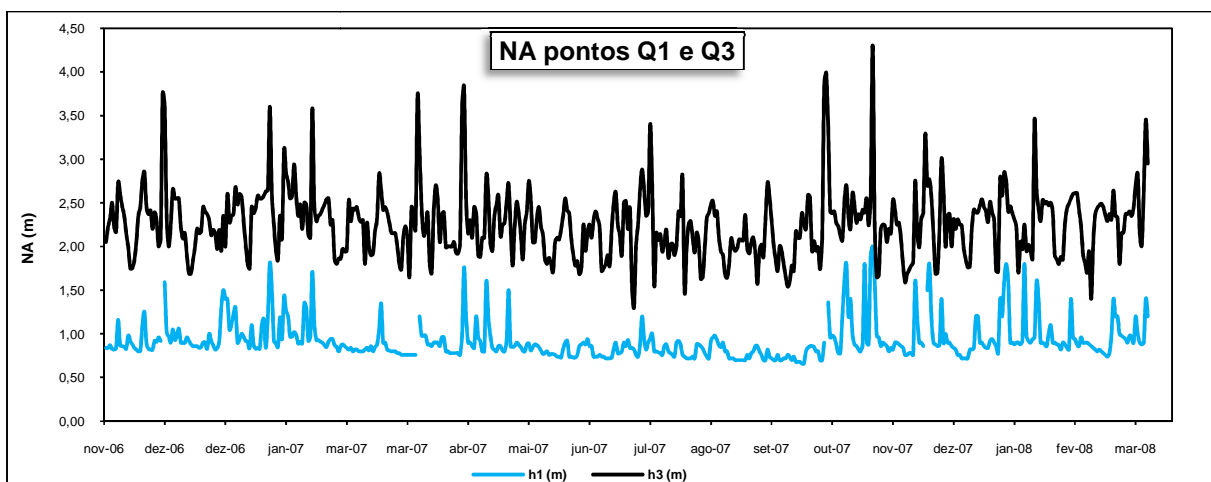


Figura 36 – Nível d'água observado nos pontos Q1 e Q3 de 11/06 a 03/08.

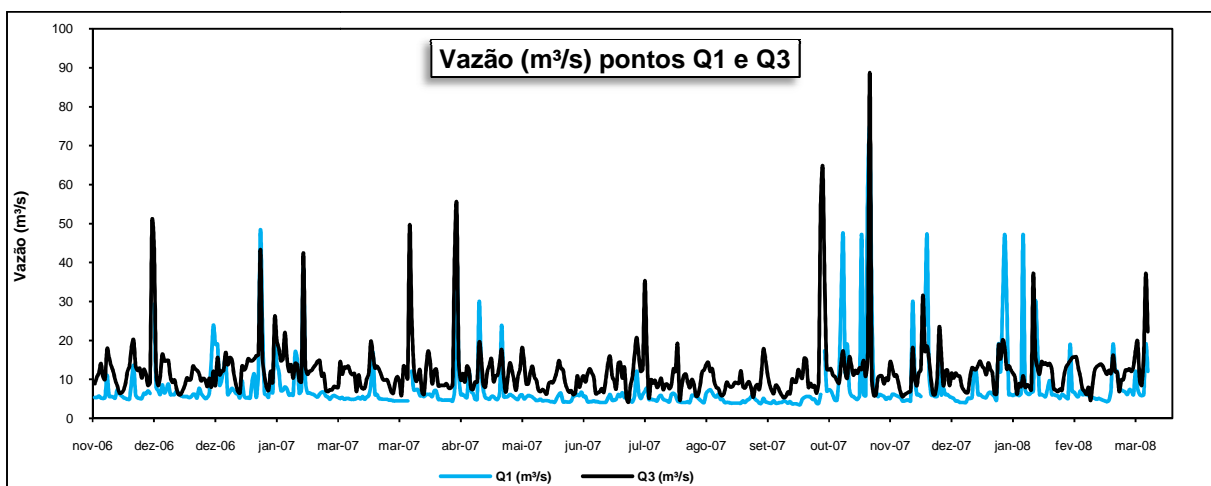


Figura 37 – Vazão calculada por curva-chave nos pontos Q1 e Q3 de 11/06 a 03/08.

Além de haver maior variabilidade no nível d'água do ponto Q3, verifica-se nos gráficos da Figura 38 que não há uma boa relação entre esse nível e vazão nesses dois pontos em função do baixo R^2 (0,3065 e 0,3005).

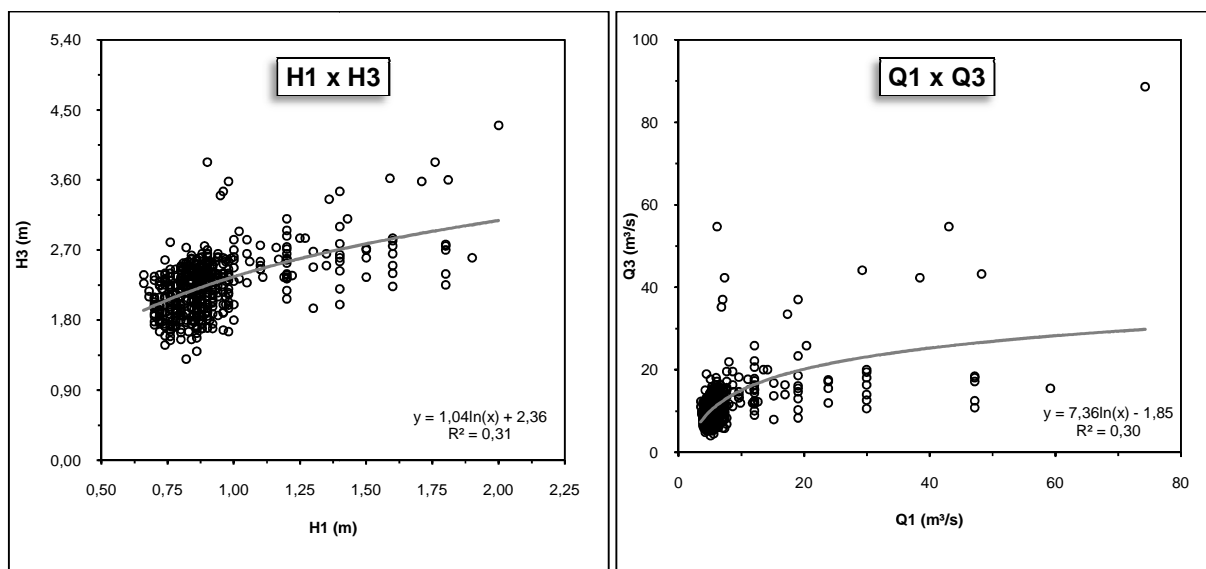


Figura 38 – Relações entre H1 e H3 e Q1 e Q3.

O coeficiente de correlação entre o nível d'água de Q1 e Q3 é de 0,55 e de 0,58 para a vazão entre os mesmos pontos, ou seja, tem-se uma baixa correlação que pode estar associada às extrações e o lançamento a montante de Q3, além de uma possível influência da maré. Tal fato é ainda corroborado pela existência de vazões menores em Q3 do que em Q1.

Entretanto, no ponto Q2 existe uma pequena barragem de cerca de 30cm de queda que pode evitar o efeito a montante em função de variação do nível de jusante. Alguns dados coletados de nível d'água a montante e jusante dessa barragem no período de 11/08 a 07/09 são apresentados nos gráficos da Figura 39.

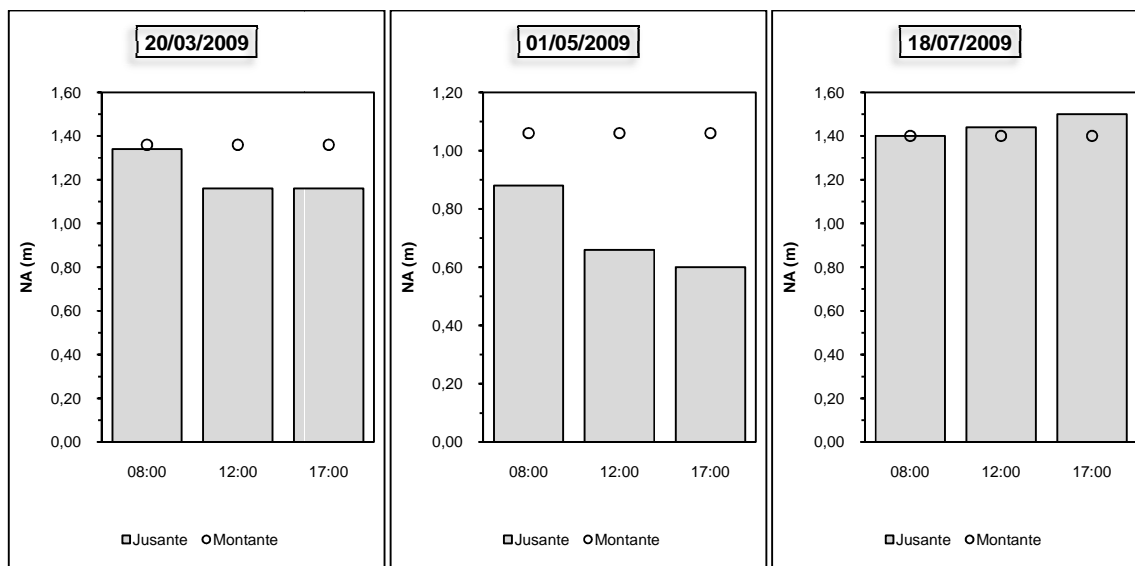


Figura 39 – NA nas proximidades do ponto Q2 onde se verifica a permanência a montante uma variação a jusante desse ponto.

Dessa forma, mesmo havendo tais extrações e o lançamento a montante de Q3, entende-se que existe influência das condições do nível de jusante no trecho Q2 a Q6, pois foram registrados níveis d'água constantes a montante de Q2 e níveis d'água variáveis ao longo de alguns dias a jusante de Q2, conforme apresentado na Figura 39.

Portanto, para uma melhor representação das condições hidrodinâmicas naturais, tornou-se necessária a inclusão do nível de jusante variável dominado pelo regime das marés. Para tanto foram utilizadas as constantes harmônicas da estação maregráfica mais próxima e as amplitudes e fases determinadas a partir de um ajuste pelos registros de nível d'água no ponto Q3 no período de 01/01/2008 a 31/03/2008.

Foi considerado que o trecho Q1-Q3 possuía as mesmas características geométricas, assim como também foi assumido que o trecho Q3-Q6 possuía as mesmas seções, sendo elas apresentadas na Figura 40.

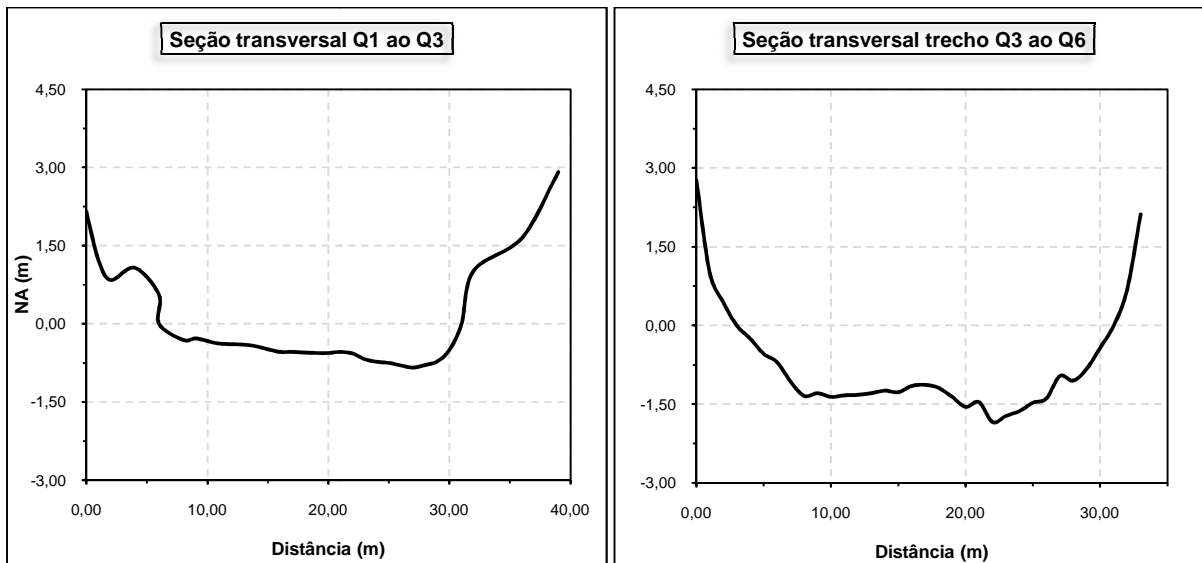


Figura 40 – Seções transversais dos trechos Q1 a Q3 e Q3 a Q6.

Como o QUAL2Kw não simula escoamentos transitórios, foi necessário o uso do software CLIV da Fundação Centro Tecnológico de Hidráulica para a determinação dos coeficientes de descarga (Equações 35 e 36) nas seções de interesse e em diferentes condições de maré (alta, média e baixa). Esse procedimento foi adotado por Fan *et al* (2009), usando o software HEC-RAS do Hydrological Engineering Center nos EUA.

Dessa forma um modelo hidrodinâmico (CLIV) é acoplado ao modelo de qualidade da água (QUAL2Kw) de forma que o primeiro defina o nível d'água de jusante que, em diferentes vazões, produzirá diferentes velocidades e profundidades. Tais grandezas físicas devem alterar as variáveis de qualidade de água.

4.4. Definição dos cenários

A vazão $Q_{7,10}$, calculada por regionalização hidrológica através do aplicativo disponível no web site do SIGRH (<http://www.sigrh.sp.gov.br>) com exultória em $23^{\circ}45'24''S$ e $46^{\circ}3'7''O$ e área de drenagem de 149km^2 , é de $2,577\text{m}^3/\text{s}$, sendo que o $Q_{95\%}$ calculado pelo mesmo programa resulta em $3,914\text{m}^3/\text{s}$, conforme apresentado na Figura 41.

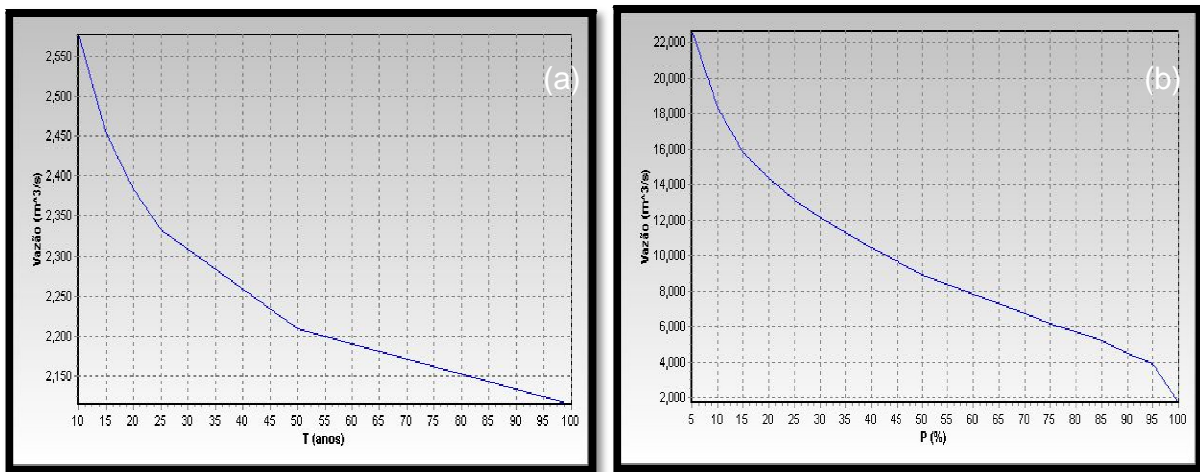


Figura 41 – $Q_{7,10}$ (a) e $Q_{95\%}$ (b) calculadas pelo aplicativo disponível no web site do SIGRH.

O gráfico da Figura 42 apresenta as vazões médias mensais do Rio Itapanhaú e os volumes médios mensais de lançamento do efluente tratado do único loteamento da região que diluía o seu efluente nesse corpo d'água na época dos levantamentos de dados de campo. As médias mensais foram divididas pela média anual, para ambas as vazões, no sentido de proporcionar uma melhor visualização da realidade do problema.

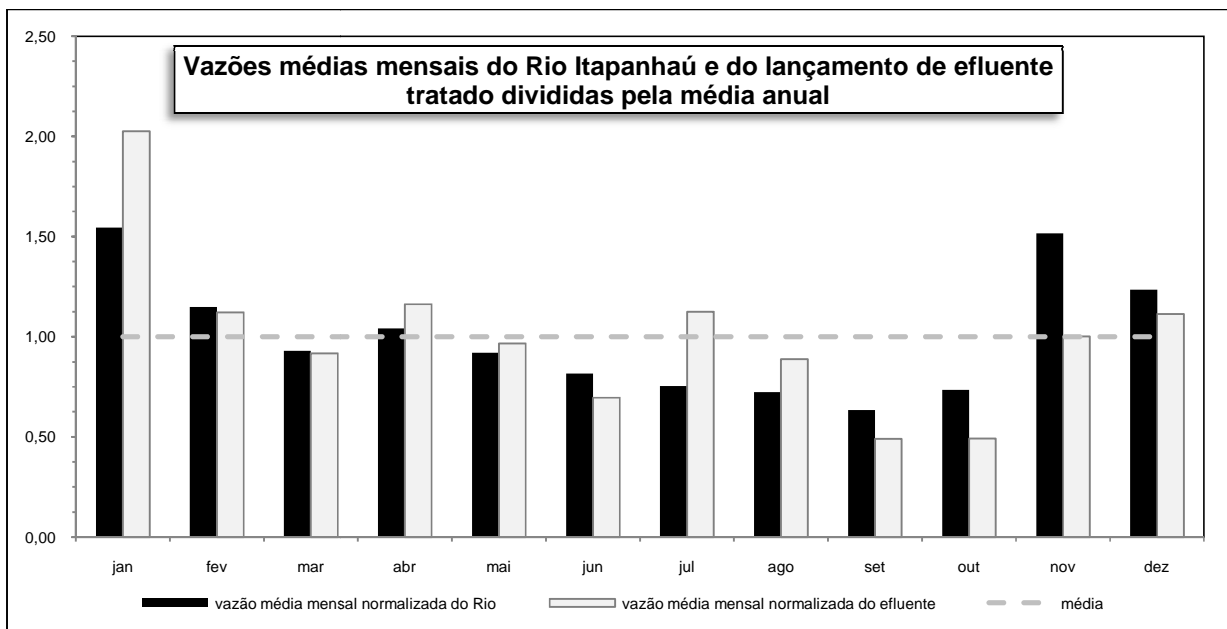


Figura 42 – Vazões médias mensais divididas pela média anual do Rio Itapanhaú e de lançamento do efluente tratado no período de novembro de 2006 a julho de 2008 extraídas a partir de dados diários.

É possível observar que nos meses úmidos (novembro a abril), além da vazão do rio ser superior à média anual, os volumes mensais de efluente lançado são também superiores à sua média em função da sazonalidade característica de cidades de veraneio. Essa relação se inverte durante os outros meses do ano, onde as vazões do rio tendem a ser menores que a média e os volumes de efluente também, com exceção de julho onde ocorre o período de férias escolares quando as vazões lançadas são maiores.

Desta forma considerou-se a importância de realizar o estudo para essas duas situações distintas, definindo-se vazões de referência e de despejo para cada um desses dois períodos.

Justifica-se a adoção dessa separação uma vez que a probabilidade de ocorrência de uma vazão mínima anual ($Q_{95\%}$ ou $Q_{7,10}$) nos meses úmidos é muito baixa, assim como seria rara a ocorrência de um volume de efluente tratado muito acima da média nos meses secos de inverno e início de primavera, principalmente.

Assim, a partir de dados de vazões diárias do rio e do lançamento no período de novembro de 2006 a julho de 2008, determinou-se o $Q_{95\%}$ para o período seco e período chuvoso, tanto para o rio quanto para o efluente. A Tabela 9 apresenta tais vazões de referência.

Tabela 9 – $Q_{95\%}$ obtida para os períodos seco e chuvoso a partir de uma série de dados diários de novembro de 2006 a julho de 2008.

Q_{95} (m ³ /s) para período seco (maio a outubro)	Q_{95} (m ³ /s) para período chuvoso (novembro a abril)
2,499	3,750

Portanto foram realizadas nove simulações, sendo três para o período seco (maré alta, baixa e média); três para o período úmido (maré alta, baixa e média) e, após a determinação do cenário mais crítico entre os dois períodos, realizou-se mais três

simulações (mesmas condições de nível citadas) aumentando-se em 50% a vazão de captação de água e lançamento do efluente do loteamento.

4.5. Configuração do modelo QUAL2Kw

O trecho em estudo foi dividido em 12 trechos de 1,50km de comprimento. O tempo de cálculo assumido foi de 10 minutos usando o método de integração de Euler. Para não haver interferência das condições iniciais, optou-se adotar o mesmo procedimento de Turner *et al* (2009), assumindo 20 dias repetidos de simulações. A Figura 43 apresenta o esquema utilizado.

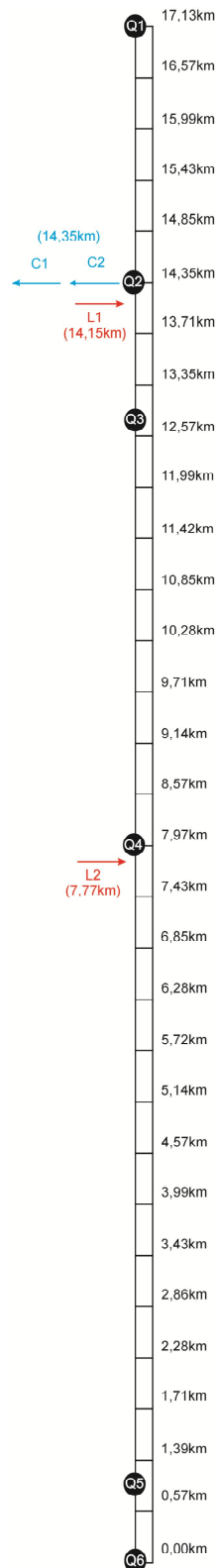


Figura 43 – Esquema de segmentação do modelo com as extrações e lançamentos.

O método de solução adotado para o pH foi o de Newton-Raphson. Considerou-se a diagênese do sedimento e a simulação da zona hiporreica foi considerada como nível 2.

Em virtude da influência da maré no nível da seção Q3 não se considerou a contribuição da água subterrânea nas simulações, uma vez que não foi possível realizar uma simples correlação entre as vazões registradas por curva-chave da seção Q1 e a diferença de vazão entre Q1 e Q3, muito provavelmente em virtude da influência de maré e das extrações e lançamento a montante de Q3.

No modelo hidráulico do QUAL2Kw (aba "REACH") foram lançados os coeficientes de descarga α , β , a e b de cada uma das seções em estudo, sendo que estes variaram conforme o nível da maré assumido.

Conforme apresentado na seção 9.4.G do Anexo A, a DBO medida nas análises foi multiplicada pelo fator 1,46, conforme sugerido pelo manual do modelo para o cômputo da $DBOC_{fast}$. Ademais, a $DBOC_{slow}$ foi considerada nula.

A razão de assumir tais simplificações foi em função dos resultados incompatíveis usando o inibidor de nitrificação, onde a DBO analisada com esse agente apresentou-se superior à DBO total. Tal fato pode ser explicado em função da imprecisão do método e dos baixos valores a serem medidos ao longo das seções selecionadas.

5. APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. Amplitudes e fases obtidas pela análise harmônica

Segundo Martins (2008), o emprego do FFT é feito a partir de valores horários de maré obtidos dos registros maregráficos contínuos. Como no presente trabalho foram utilizados apenas 2 registros diários no período de 01/01/08 a 31/03/08, foi empregado o método dos mínimos quadrados.

A FEMAR (Fundação de Estudos do Mar) disponibiliza em seu website (<http://www.femar.com.br>) o Catálogo de Estações Maregráficas Brasileiras, onde fora utilizada como base de estudos a ficha da estação Ilha de Barnabé (Figura 44), no município de Santos - SP, pois era a estação maregráfica mais próxima disponível.

FEMAR-FUNDAÇÃO DE ESTUDOS DO MAR <i>Catálogo de Estações Maregráficas Brasileiras</i>					
Nome da Estação :		ILHA BARNABÉ – SP			
Localização :		Porto de Santos, no antigo trapiche de acesso à Ilha			
Organ. Responsável :		CODESP / DHN			
Latitude :		23° 55,7' S	Longitude :		46° 19,9' W
Período Analisado :		27/09/74 a 29/11/74		Nº de Componentes : 24	
Análise Harmônica :		Método Almirante Santos Franco			
Classificação :		Maré de Desigualdades Diurnas			
Estabelecimento do Porto: (HWF&C)		II H 59 min	Nível Médio (Zo):		74 cm acima do NR.
Média das Preamares Superiores (MHHW) :		142 cm acima do NR.	Média das Preamares Inferiores (MLHW) :		129 cm acima do NR.
Média das Baixa-mares Superiores (MHLW) :		23 cm acima do NR.	Média das Baixa-mares Inferiores (MLLW) :		2 cm acima do NR.
CONSTANTES HARMÔNICAS SELECIONADAS					
Componentes	Semi-amplitude (H) cm	Fase (g) graus (°)	Componentes	Semi-amplitude (H) cm	Fase (g) graus (°)
Sa	-	-	MU ₂	-	-
Ssa	-	-	N ₂	5,1	146
Mm	-	-	NU ₂	1,0	138
Mf	-	-	M ₂	38,4	086
MTM	-	-	L ₂	-	-
Msf	-	-	T ₂	1,4	088
Q ₁	2,5	051	S ₂	23,3	088
O ₁	11,4	083	K ₂	6,3	088
M ₁	-	-	MO ₃	1,7	086
P ₁	2,1	152	M ₃	5,5	245
K ₁	6,2	158	MK ₃	3,4	105
J ₁	-	-	MN ₄	-	-
OO ₁	-	-	M ₄	2,7	348
MNS ₂	-	-	SN ₄	-	-
2N ₂	0,7	206	MS ₄	3,6	144
Referências de Nível: RN 1 implantada na escada do prédio da antiga Alfândega de Santos					
Obs: Não há referências a outros períodos Ver também a estação BNDO 50221 - Barnabé					
Código BNDO: 50226					

Figura 44 – Constantes harmônicas da estação Ilha Barnabé publicadas pela FEMAR com suas respectivas amplitudes e fases (<http://www.femar.com.br>).

Assumiu-se que a maré no ponto Q3 contemplava as mesmas componentes da estação da Ilha Barnabé, porém, em função das interações com o afunilamento com estuário e o rio, as amplitudes e fases sofrem alterações.

Assim, em uma planilha Excel com a ferramenta SOLVER buscou-se minimizar o erro quadrático entre os valores observados e os calculados pela própria planilha, variando-se as amplitudes e fases de cada uma das componentes. Obteve-se um novo conjunto de fases e amplitudes para cada uma das 29 constantes harmônicas, conforme apresentado na Tabela 10.

Tabela 10 - Amplitudes e fases das constantes harmônicas no ponto Q3.

Número	1	2	3	4	5	6	7	8
Componente	M2	S2	M4	O1	M3	SSA	K2	SA
Amplitude	0,000	0,364	0,012	0,000	0,019	0,000	0,000	0,000
Fase	86,0	88,0	304,0	83,0	245,0	0,0	88,0	0,0
Número	9	10	11	12	13	14	15	16
Componente	MS4	MO3	MN4	N2	K1	MF	MSF	MK3
Amplitude	0,006	0,000	0,016	0,000	0,321	0,000	0,109	0,096
Fase	144,0	0,0	0,0	143,0	158,0	0,0	0,0	105,3
Número	17	18	19	20	21	22	23	24
Componente	Q1	MU2	L2	2N2	P1	T2	SN4	NU2
Amplitude	0,009	0,061	0,063	0,058	0,000	0,305	0,000	0,000
Fase	0,0	0,1	0,0	0,0	152,2	0,0	0,0	0,0
Número	25	26	27	28	29			
Componente	OO1	M1	MM	MNS2	J1			
Amplitude	0,000	0,000	0,072	0,045	0,000			
Fase	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0			

O gráfico da Figura 45 apresenta os dados observados e os calculados pela planilha. Observa-se que houve discordâncias entre tais valores, principalmente aqueles abaixo de 2,00m e acima de 2,60m, uma vez que deve haver outras componentes de águas rasas não listadas naquelas da Ilha Barnabé, além do possível efeito do ruído meteorológico. A soma do erro médio quadrático foi de 10,82m², sendo o erro máximo de 1,19m e o médio de 0,019m.

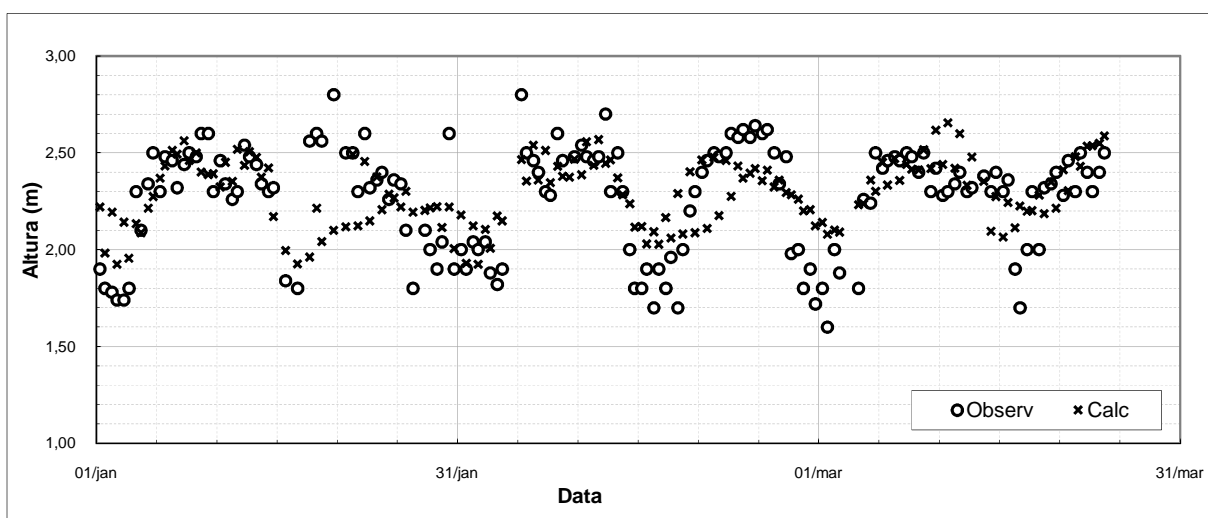


Figura 45 – Níveis d'água observados e calculados no período de 01/01/08 a 31/03/08 no ponto Q3.

O gráfico da Figura 46 apresenta a correlação entre os dados observados e calculados pela planilha, onde é verificado um ajuste ruim, porém como a maioria dos pontos ficou dentro do intervalo de $\pm 10\%$, os parâmetros de maré foram utilizados para a determinação do nível d'água de jusante.

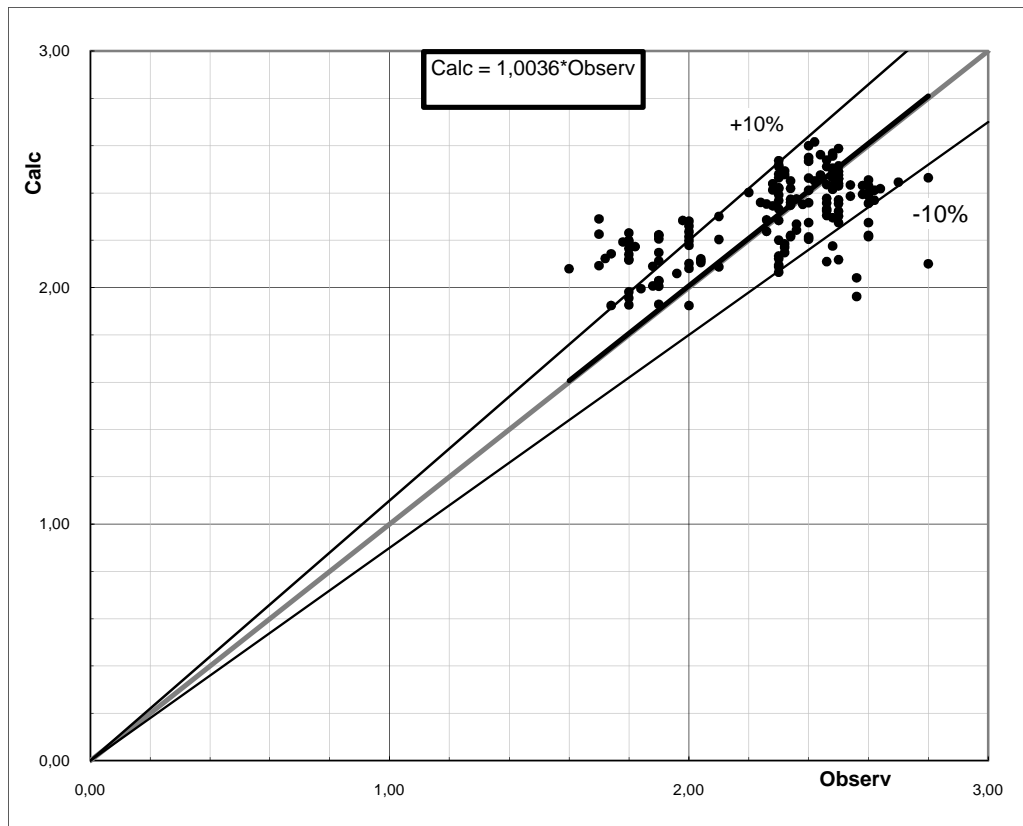


Figura 46 – Correlação entre os níveis d’água calculados e observados no período de 01/01/08 a 31/03/2008.

Uma vez determinadas as novas amplitudes e fases das constantes harmônicas no ponto Q3, gerou-se uma série 4 meses de dados (01/10/09 a 31/01/2010) de nível d’água a cada 3 horas e transportou-se ao ponto Q6, sendo tal nível considerado como condição de contorno de jusante para o CLIV (Figura 47). Esse período foi selecionado em virtude de englobar as datas das amostragens para a calibração do QUAL2Kw.

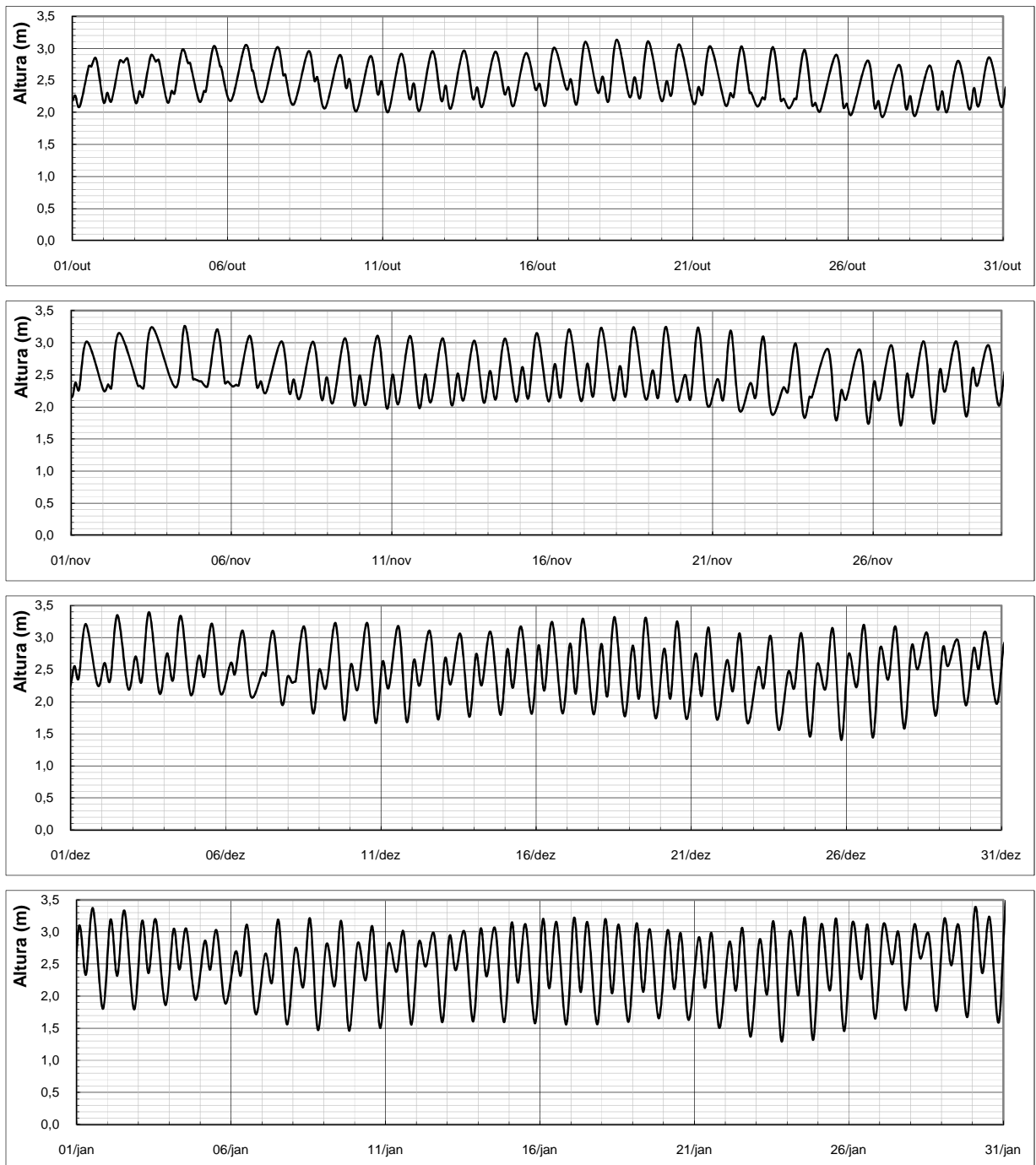


Figura 47 – Níveis d'água assumidos como condição de contorno de jusante no ponto Q6 obtidos a partir das novas amplitudes e fases das constantes harmônicas no ponto Q3.

5.2. Resultados do CLIV e determinação dos coeficientes de descarga

Os resultados de nível d'água, profundidade e velocidade ao longo do trecho simulado são apresentados nas Figuras 48 a 50, para condição de NA de jusante máximo calculado de 3,333m em 03/12/09 às 12:00h e mínimo de 1,602m em 24/01/09 às 21:00h para vazões de 2, 10, 30, 50 e 70 m³/s; ambos os NA's foram obtidos da série apresentada na Figura 48.

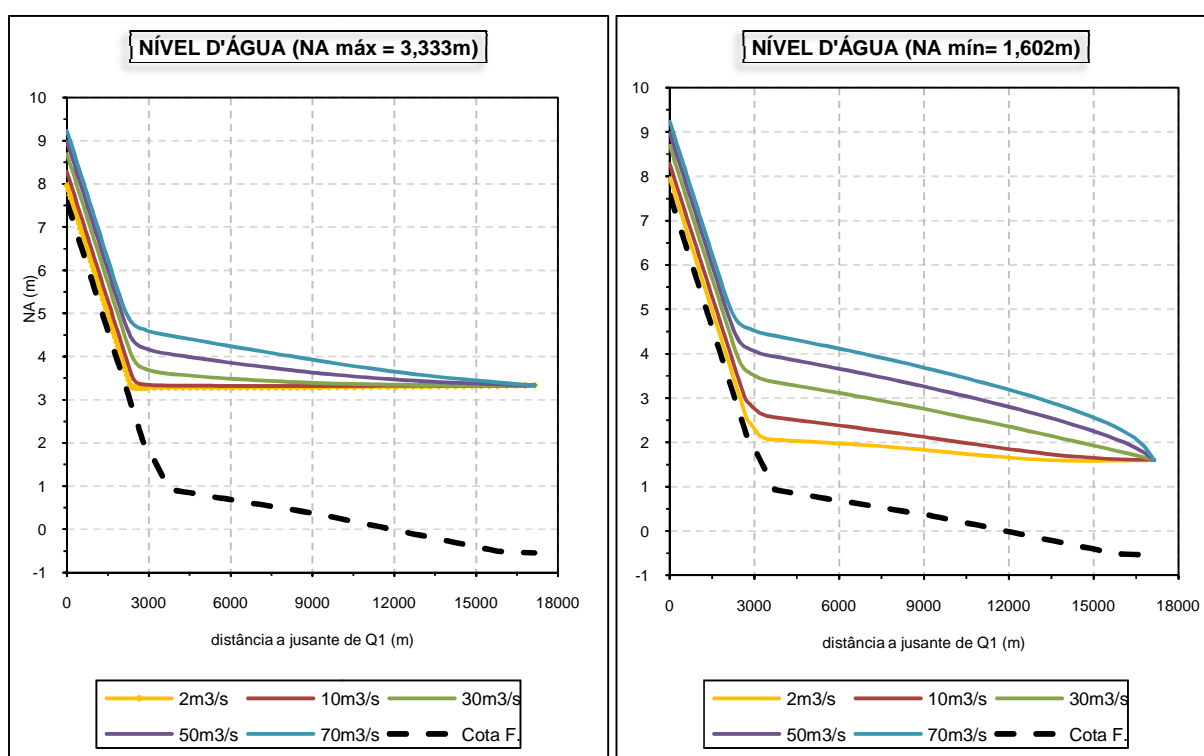


Figura 48 – Resultados de NA relativos às diferentes vazões simuladas para os níveis d'água máximo e mínimo de jusante ao longo do trecho simulado.

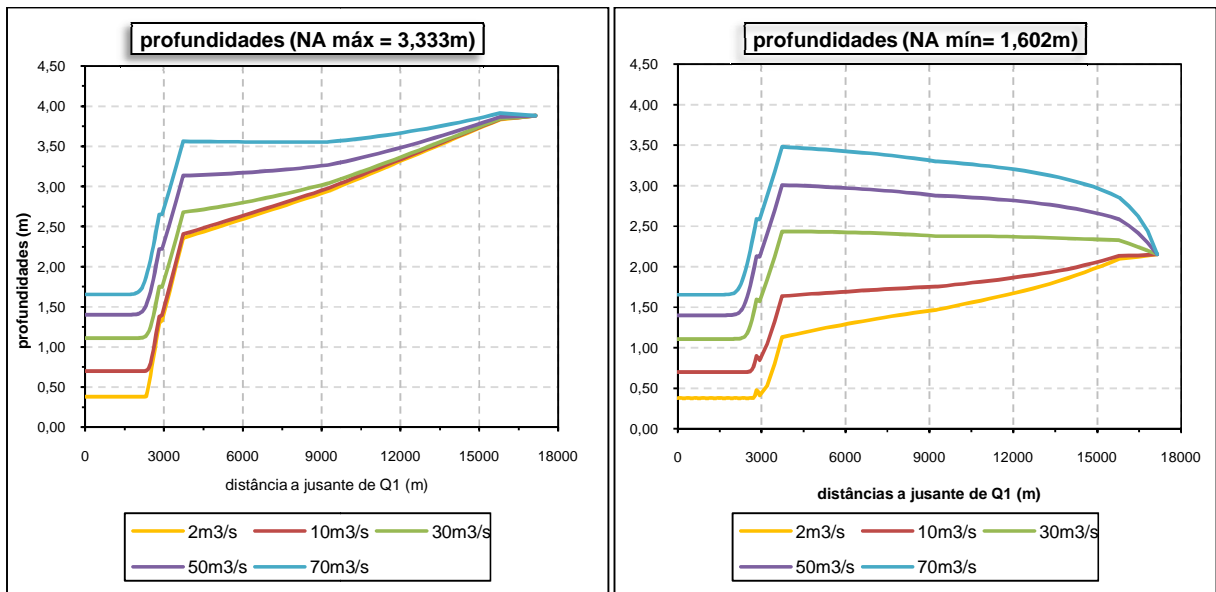


Figura 49 – Resultados de profundidades relativas às diferentes vazões simuladas para os níveis d'água de jusante máximo e mínimo ao longo do trecho simulado.

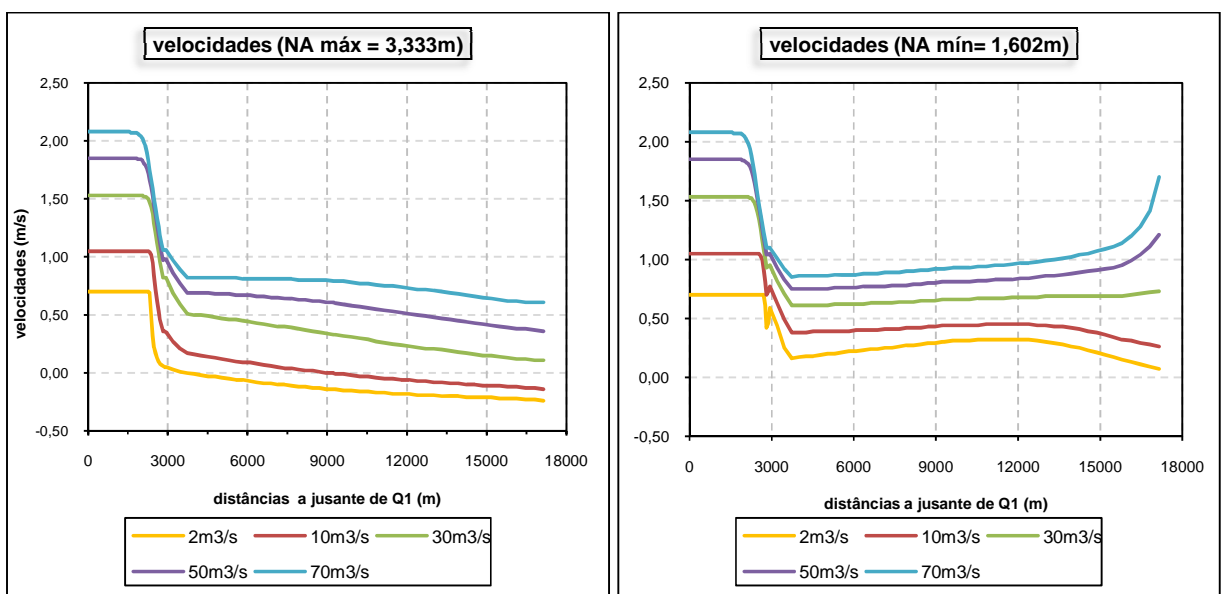


Figura 50 – Resultados de velocidades relativas às diferentes vazões simuladas para os níveis d'água de jusante máximo e mínimo ao longo do trecho simulado.

Analisando os resultados apresentados nas Figuras 48 a 50 é possível observar que na situação de nível máximo há um acúmulo de água à jusante e, portanto as profundidades são maiores e as velocidades são menores ao longo do eixo do rio.

Inversamente, na situação de nível d'água mínimo à jusante têm-se, em geral, maiores velocidades e menores profundidades ao longo do eixo do rio. Entretanto, na Figura 48 (NAMín) verifica-se que houve um declínio nas velocidades para as vazões $2\text{m}^3/\text{s}$ e $10\text{m}^3/\text{s}$ em virtude de que o nível correspondente à tais vazões é ainda baixo o suficiente para que não sofra influência da condição de contorno de jusante.

Para essas mesmas vazões e condições de nível máximo, verificam-se ainda que as velocidades e profundidades começam a sofrer influência da maré mais a montante em relação à condição em nível mínimo. Tal fato ocorre pela mesma situação citada, uma vez que vazões baixas têm maior sensibilidade ao efeito do nível alto de jusante.

É importante salientar que as velocidades negativas apresentadas foram descartadas na criação das curvas de descarga, uma vez que não é possível a determinação matemática de relações exponenciais entre números positivos e negativos.

5.3. Determinação dos coeficientes de descarga

Para a determinação dos coeficientes de descarga médios foram simuladas no CLIV as vazões de 2, 10, 30, 50 e $70\text{ m}^3/\text{s}$, cada uma com 961 pontos referentes aos NA`s obtidos na Figura 47. Posteriormente geraram-se gráficos de dispersão entre H e Q e v e Q onde foram determinados os coeficientes de descarga para marés altas, médias e baixas através da inserção de curvas que envolveram os limites inferiores e superiores das nuvens de pontos de cada seção. Os resultados são apresentados nas Figuras 51 a 55.

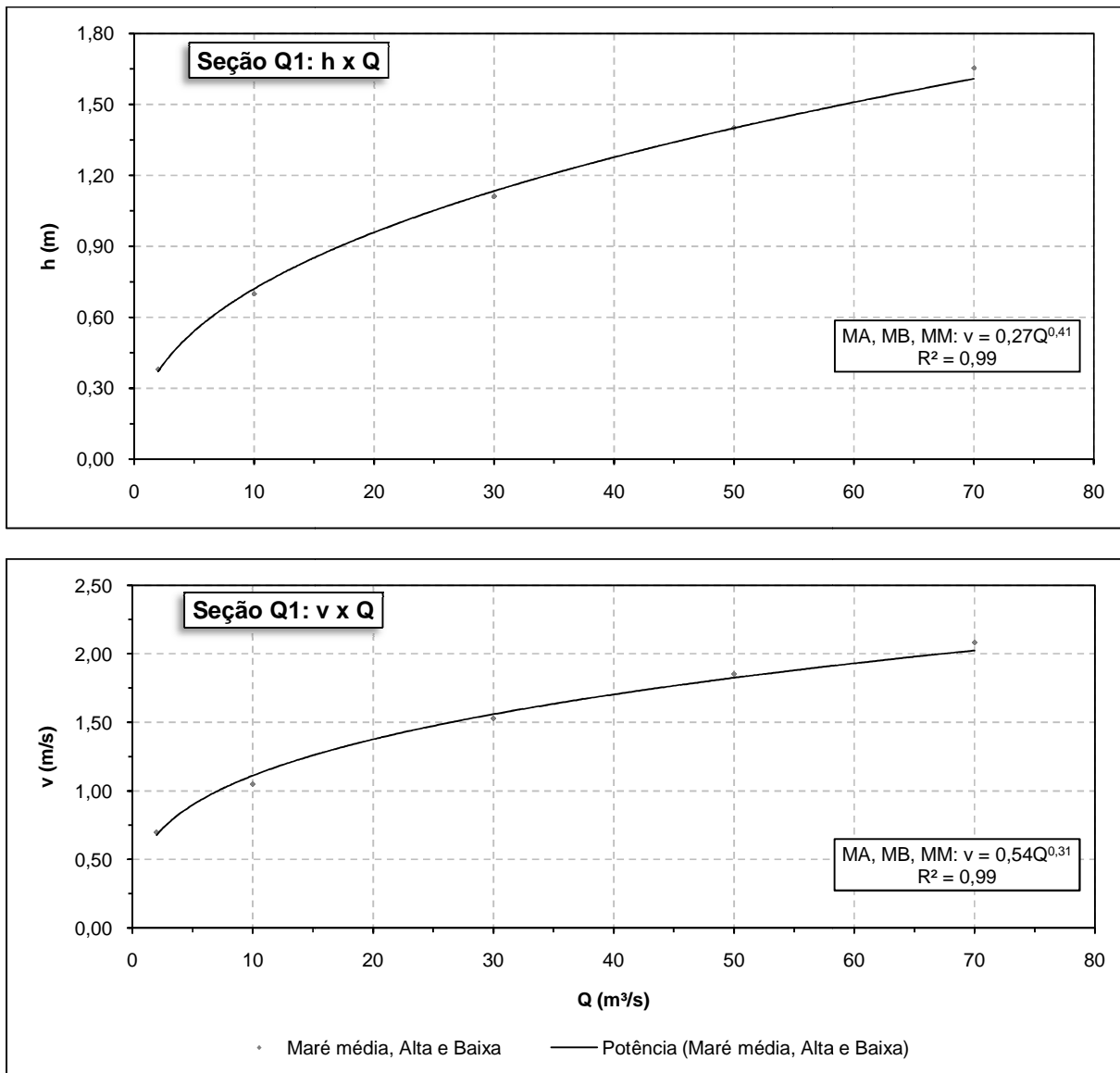


Figura 51 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q1 (MA, MB e MM correspondem à maré alta, maré baixa e maré média, respectivamente).

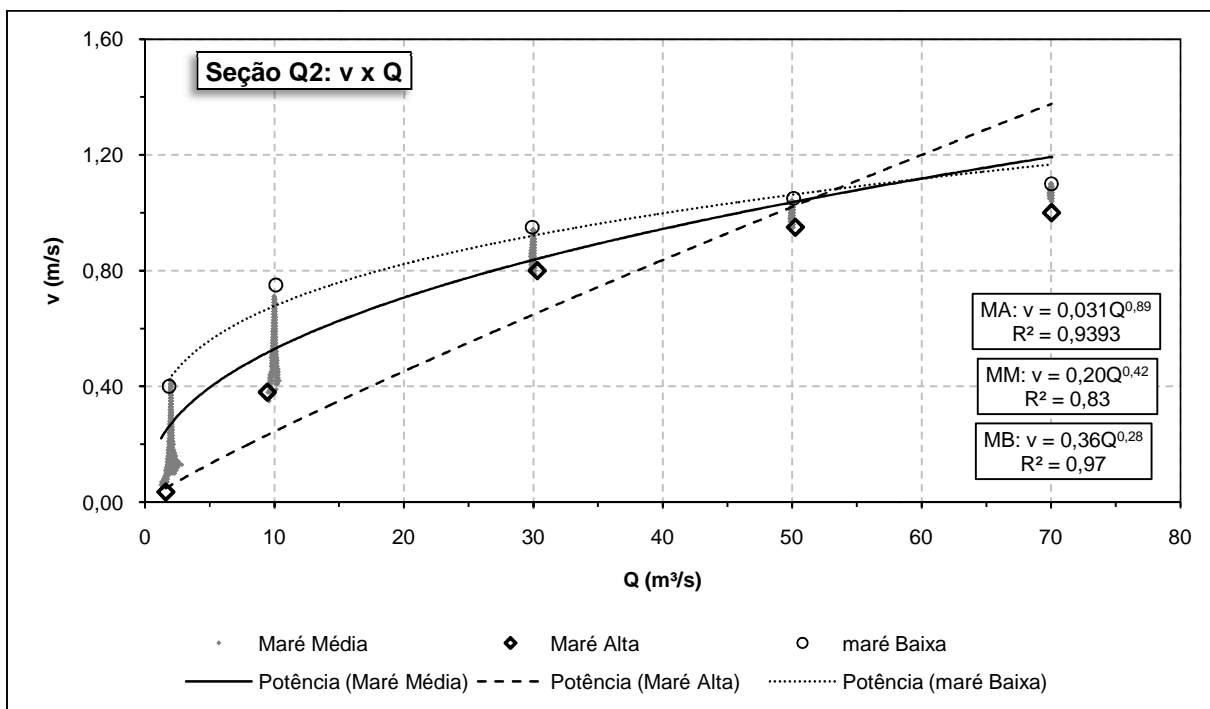
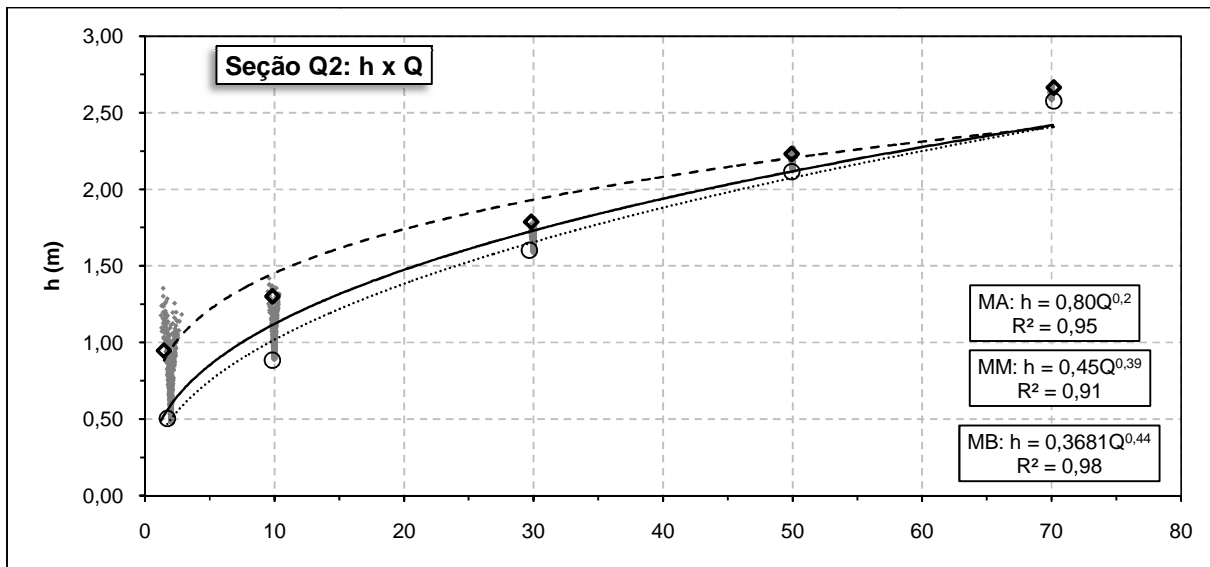


Figura 52 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q2.

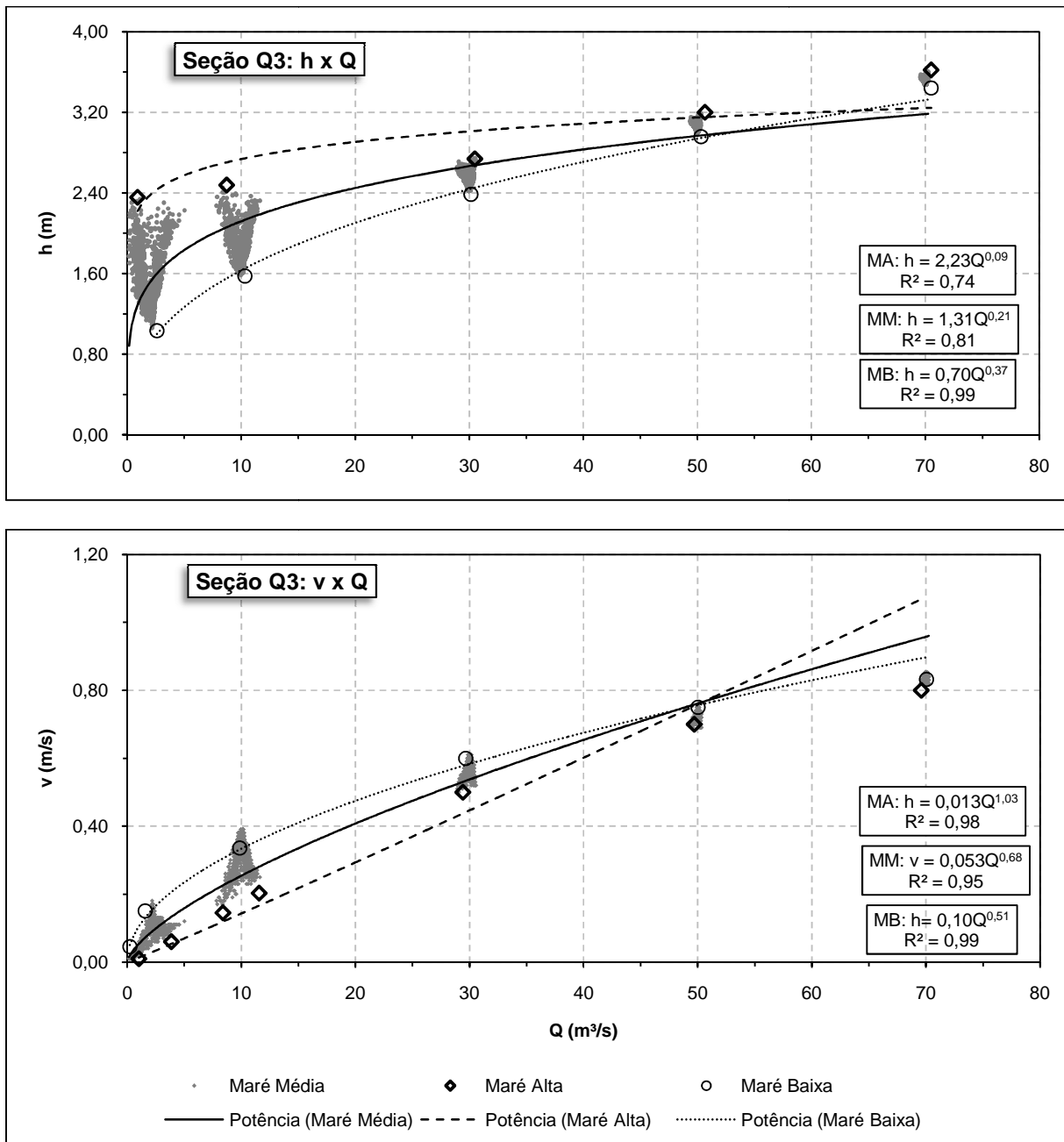


Figura 53 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q3.

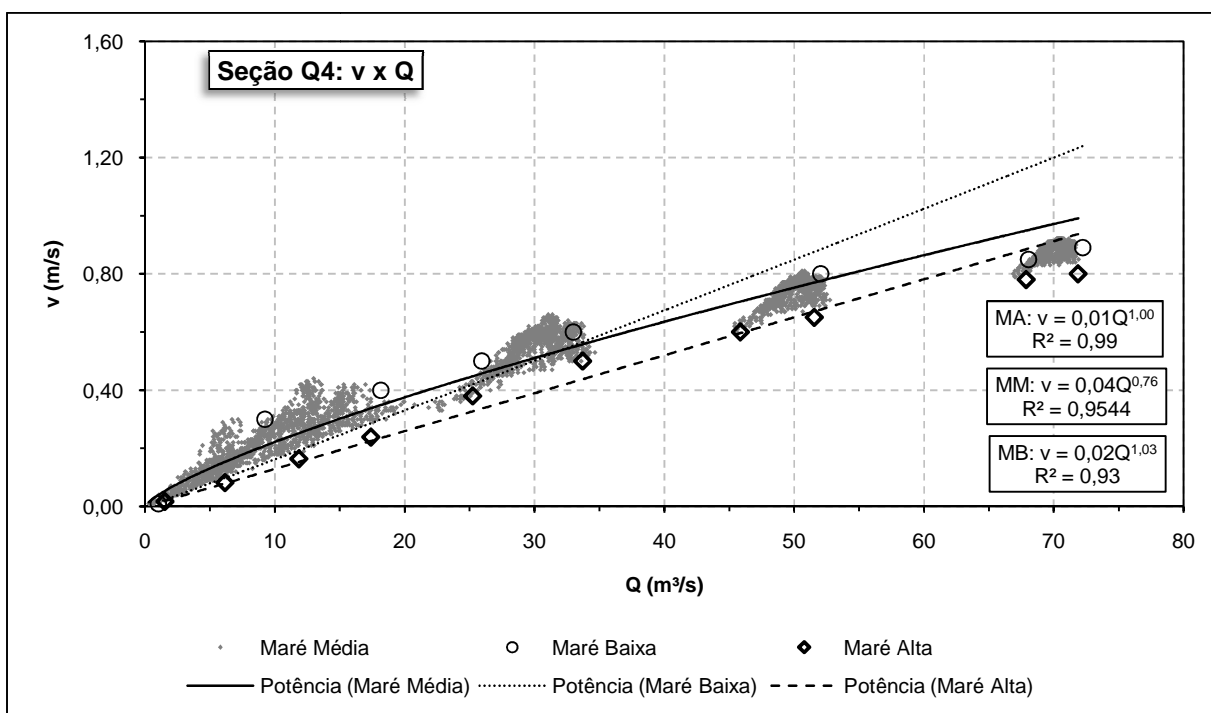
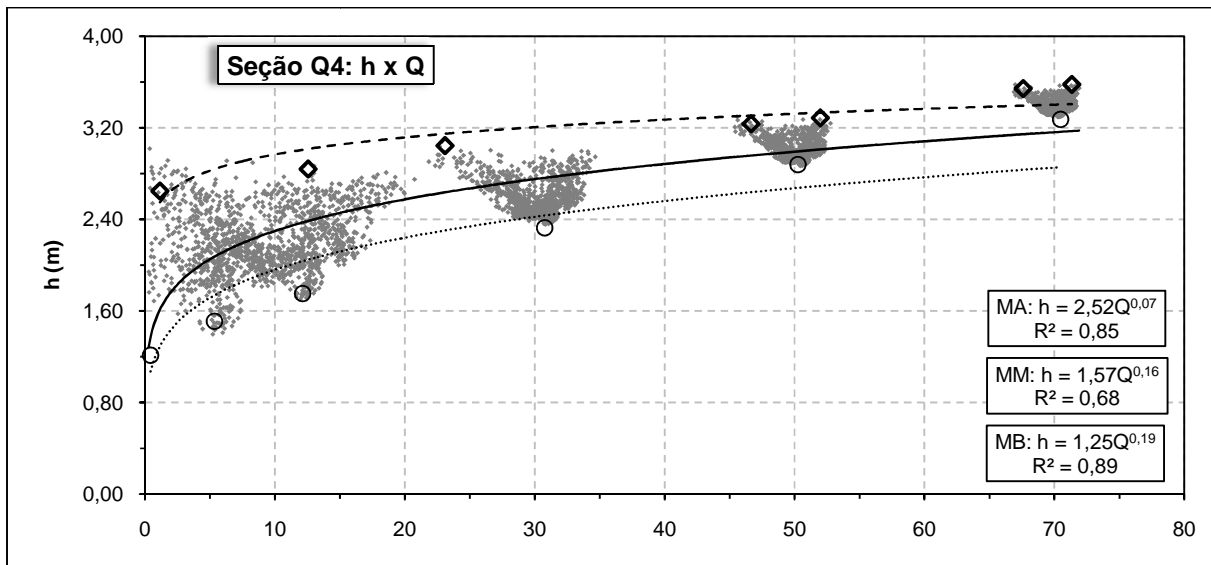


Figura 54 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q4.

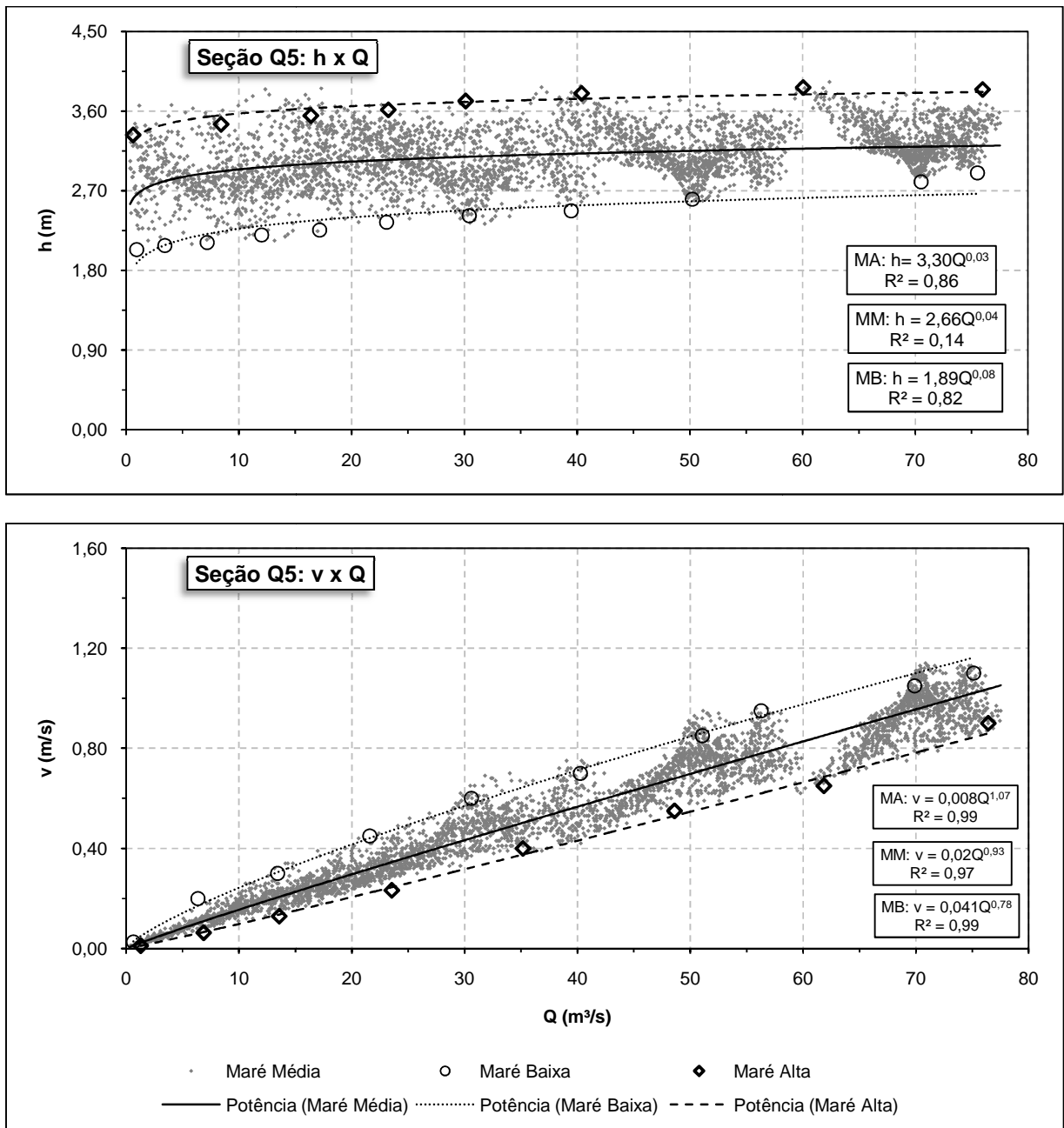


Figura 55 – Determinação dos coeficientes de descarga para a seção Q5.

De acordo com os gráficos das Figuras 51 a 55 e os gráficos da Figura 48 (NA ao longo do rio para diferentes vazões), é possível identificar que a partir do ponto Q2 e, dependendo da vazão e nível do rio, a condição de contorno de jusante passa a

influenciar o regime do escoamento em função desse trecho estar em uma porção mais baixa onde sofre influência da maré. Pelos gráficos da Figura 51 (seção Q1) não há essa influência em função deste ponto estar em uma cota elevada.

Entretanto todos os outros pontos passam a não mais possuir uma relação unívoca entre v e Q ou H e Q uma vez que uma mesma vazão pode apresentar diferentes velocidades e profundidades em função do nível da maré a jusante. Assim observa-se uma significativa dispersão de pontos nos gráficos de velocidade e profundidade das seções Q2, Q3, Q4 e Q5, o mesmo não ocorrendo na seção Q1.

Os coeficientes de descarga para cada seção e para cada NA de jusante das Figuras 51 a 55 são apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 - Coeficientes de descarga para cada seção e para cada NA de jusante.

seção Q1					seção Q4				
	v		H			v		H	
maré	a	b	α	β	maré	a	b	α	β
média	0,5464	0,3082	0,2787	0,4125	média	0,0386	0,7593	1,5757	0,1638
baixa	0,5464	0,3082	0,2787	0,4125	baixa	0,0151	1,0295	1,2571	0,1927
alta	0,5464	0,3082	0,2787	0,4125	alta	0,0127	1,0056	2,5232	0,0703

seção Q2					seção Q5				
	v		H			v		H	
maré	a	b	α	β	maré	a	b	α	β
média	0,2022	0,4177	0,452	0,3947	média	0,018	0,9347	2,6639	0,0428
baixa	0,3566	0,279	0,3681	0,4421	baixa	0,0405	0,7773	1,8907	0,0794
alta	0,0316	0,8886	0,8013	0,2587	alta	0,0084	1,0673	3,313	0,0327

seção Q3				
	v		H	
maré	a	b	α	β
média	0,053	0,6813	1,3094	0,209
baixa	0,1037	0,508	0,7044	0,365
alta	0,0132	1,0362	2,2376	0,0873

5.4. Calibração do modelo

A calibração do modelo foi realizada pelo algoritmo genético, sendo utilizadas 100 gerações e 100 simulações dentro de uma mesma população, uma vez que Pelletier *et al* (2006) verificaram que o acréscimo destes parâmetros não resultava em ganhos sensíveis na qualidade do ajuste. Os outros parâmetros utilizados no PIKAIA são apresentados na Tabela 12.

Tabela 12 – Parâmetros utilizados no PIKAIA para a calibração do modelo.

<i>Auto-calibration genetic algorithm control:</i>		
Random number seed	123456	seed
Model runs in a population (<=512)	100	np
Generations in the evolution	100	ngen
Digits to encode genotype (<=6)	6	nd
Crossover mode (1, 2, 3, 4, 5, 6, or 7)	5	icross
Crossover probability (0-1):	0,85	pcross
Mutation mode (1, 2, 3, 4, 5, or 6)	2	imut
Initial mutation rate (0-1):	0,005	pmut
Minimum mutation rate (0-1):	0,0005	pmutmn
Maximum mutation rate (0-1):	0,25	pmutmx
Relative fitness differential (0-1):	1	fdif
Reproduction plan (1, 2, or 3):	1	irep
Elitism (0 or 1):	1	ielite
Restart from previous evolution (0 or 1):	0	irestart

Foram utilizados simultaneamente 3 microcomputadores para a autocalibração: PENTIUM IV 2,4GHz 1,5GB RAM; Intel Pentium IV 3,06GHz 1GB RAM e SEMPRON 3000+ 1,8GHz 1GB RAM, sendo necessárias 86, 98 e 48 horas, respectivamente para completar o processo.

A autocalibração foi realizada a partir da média das concentrações observadas nas campanhas de dados coletados nos dias 01/10/2009, 05/11/2009 e 17/12/2009, uma vez que não houve um bom ajuste para a calibração nestes dias individualmente.

A dificuldade da calibração ocorreu em virtude da presença de dados extremos que foram observados provavelmente em virtude da intermitência do lançamento do empreendimento e das duas abstrações, onde não há uma regularidade no regime em função das baixas vazões noturnas de água consumida e esgoto gerado. Talvez uma amostragem composta ao longo do dia, respeitando o tempo de trânsito no lançamento, poderia ter evitado concentrações díspares que ocorreram tanto na forma de concentrações ou medições baixas (como ocorreu com o pH no dia 17/12/09) ou nulas (clorofila em 05/11 e 17/12) como em concentrações altas (DBO em 05/11).

Portanto assumiu-se a hipótese que as condições de qualidade de água do rio, nessa época do ano, são as médias dessas três observações. Dessa forma a calibração para as três situações de nível de jusante buscou determinar os parâmetros do modelo QUAL2Kw para cada uma dessas condições hidrodinâmicas.

Assumiram-se pesos de valor 100 na Equação 45 para as variáveis OD, DBO e pH, e valor 10 para as variáveis NH_3 , NO_3 , P_{total} e Clorofila-a. Os inversos dos RMEQ's obtidos pela autocalibração foram de 2,85264, 2,96248 e 2,83116, para maré alta, média e baixa, respectivamente.

Foi ainda necessário o ajuste manual da taxa de nitrificação da amônia (k_{na}) para cada um dos trechos. A reaeração foi simulada pela forma interna no modelo, onde o método é selecionado conforme relações entre profundidade e velocidade (Anexo A, seção 9.5.N). Na Tabela do Anexo B são apresentados os coeficientes obtidos na calibração para as três condições hidrodinâmicas.

Nas Figuras 56 a 62 são apresentados os resultados da calibração para as variáveis de qualidade de água OD, DBO, N- NH_3 , NO_3 , P_{total} , Clorofila-a e pH. As captações do loteamento e SABESP, bem como o lançamento do loteamento e o Rio Bananal são identificados como cap_lot, cap_SBP, lct_lot e Bananal, respectivamente. A captação da SABESP foi considerada $0,42\text{m}^3/\text{s}$, volume outorgado pelo DAEE.

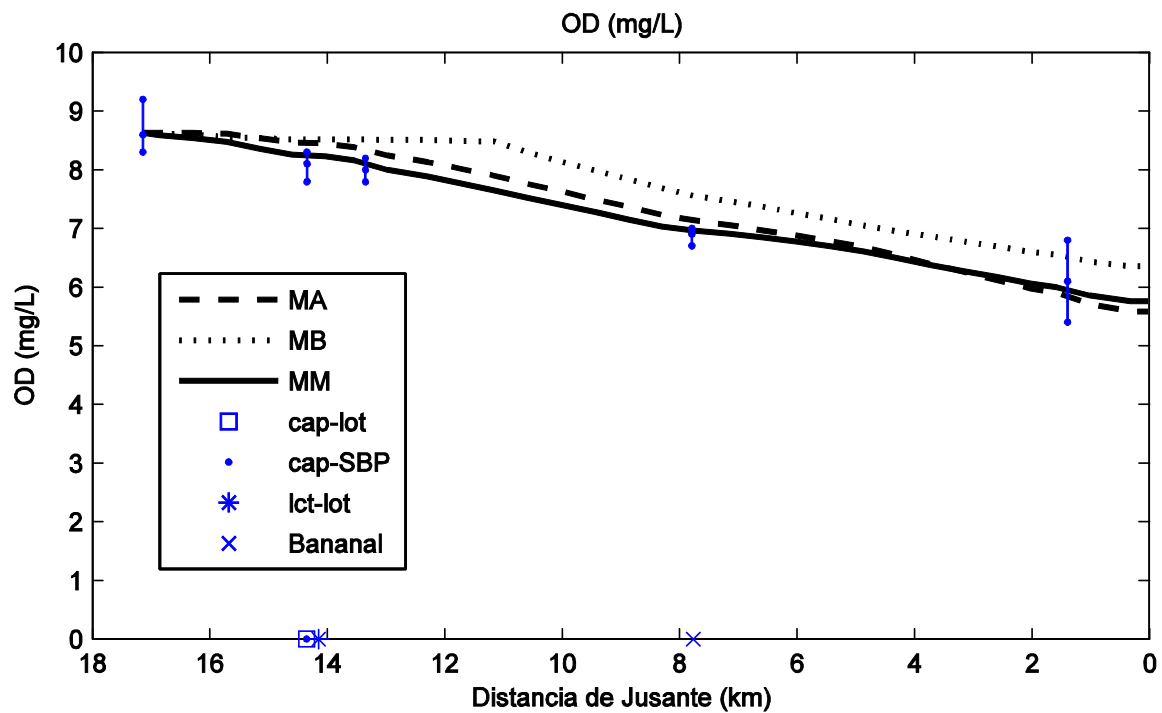


Figura 56 – Resultado da calibração para o OD.

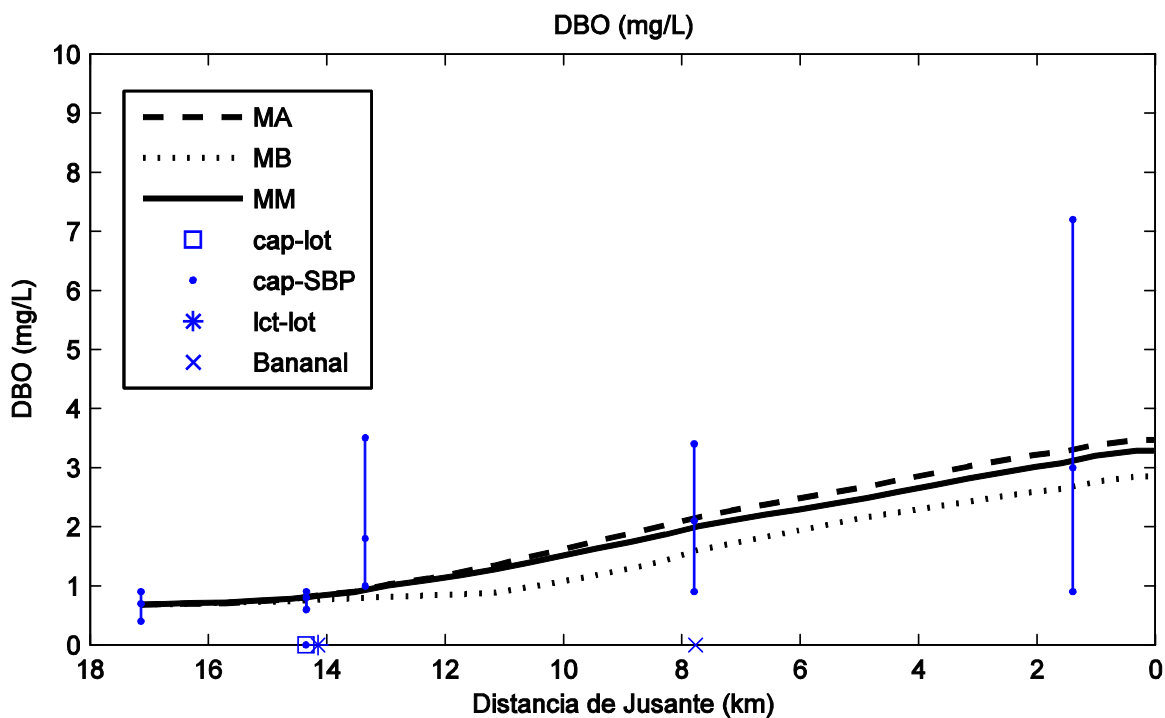


Figura 57 – Resultado da calibração para a DBO.

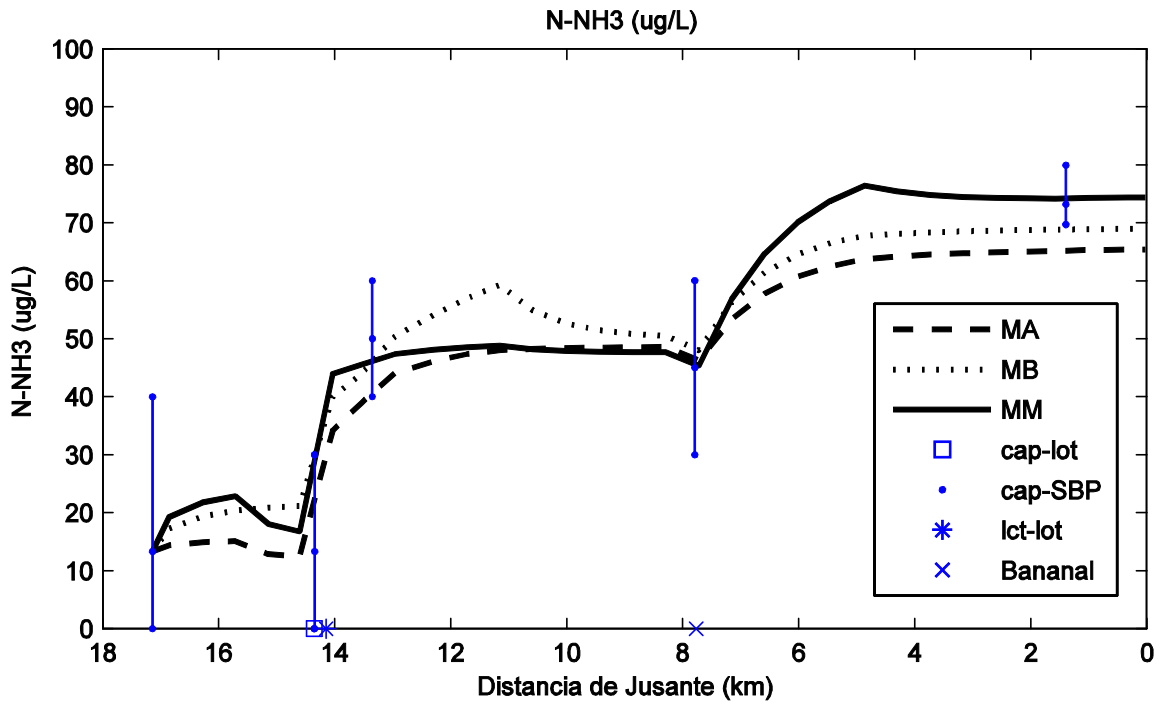


Figura 58 – Resultado da calibração para o N-NH₃.

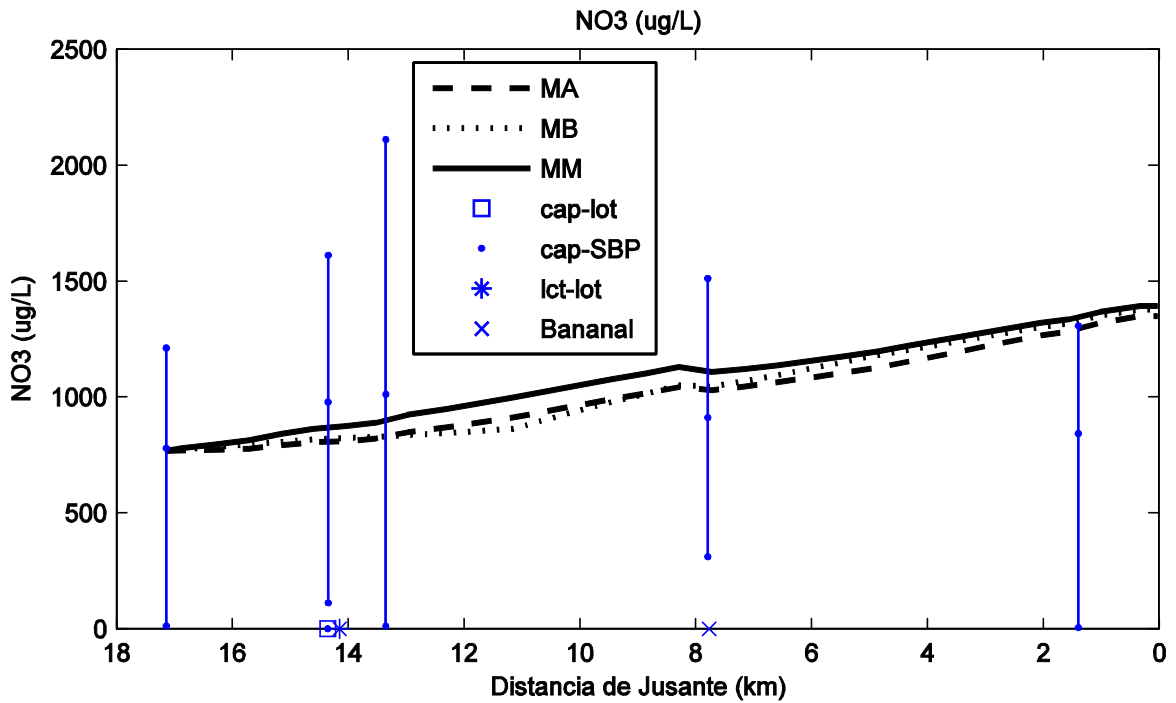


Figura 59 – Resultado da calibração para o NO₃.

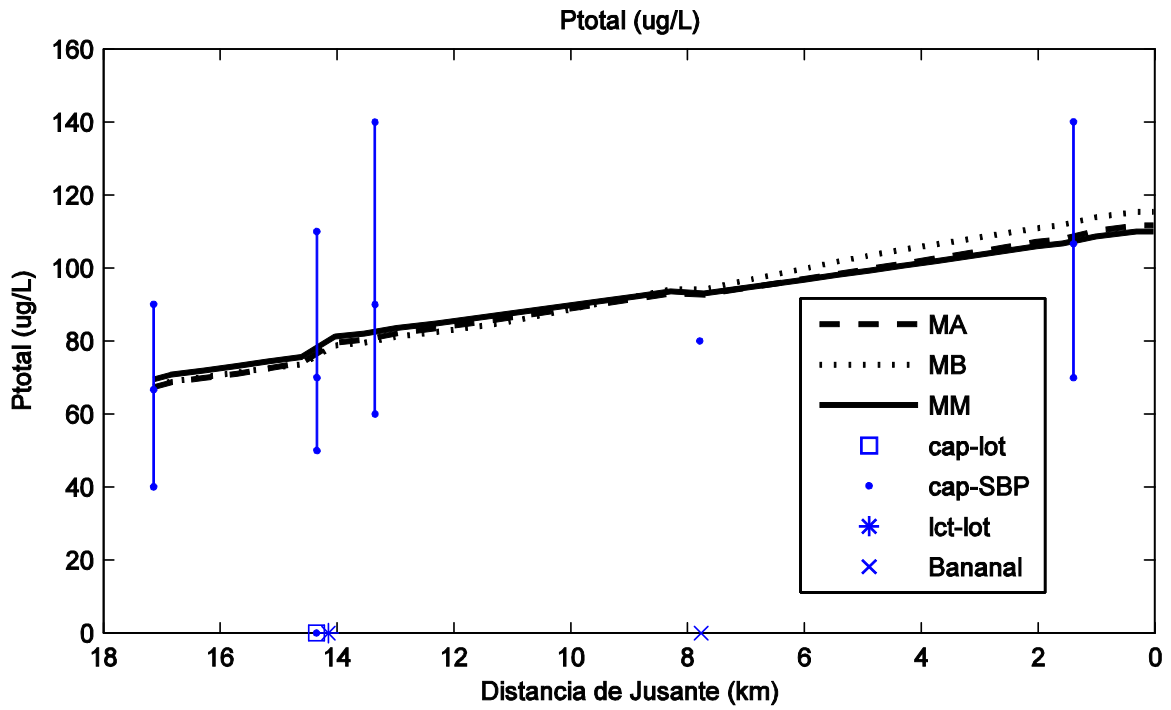


Figura 60 – Resultado da calibração para o P_{total} .

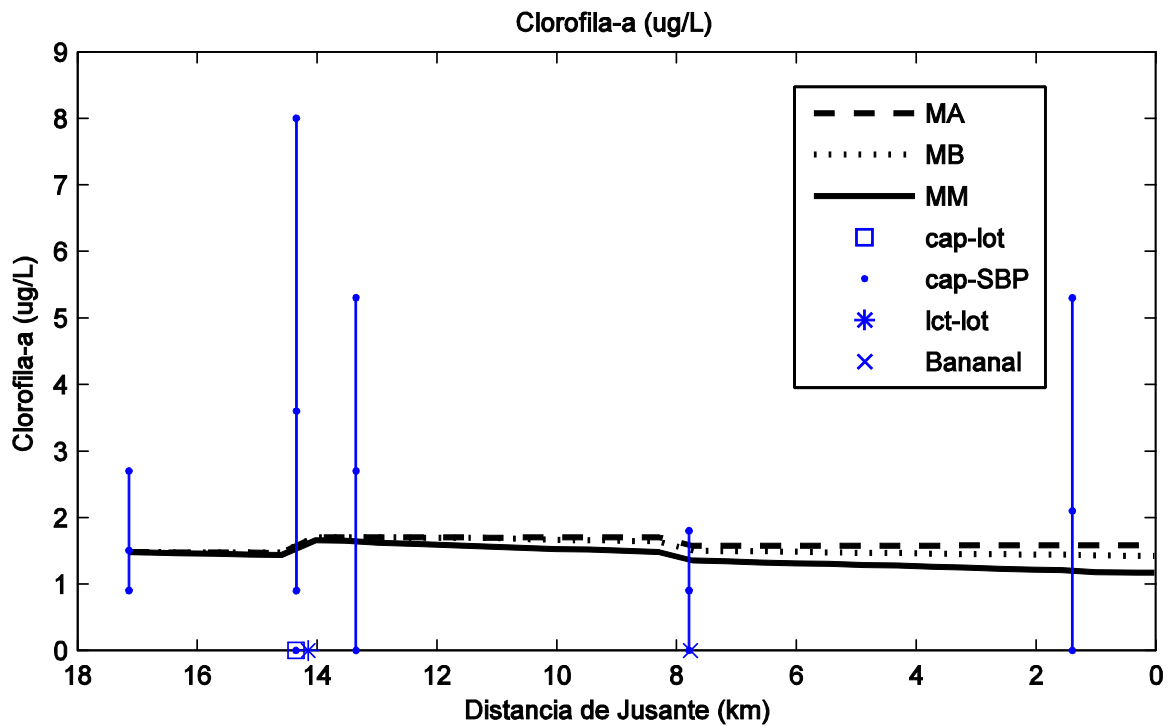


Figura 61 – Resultado da calibração para a Clorofila-a.

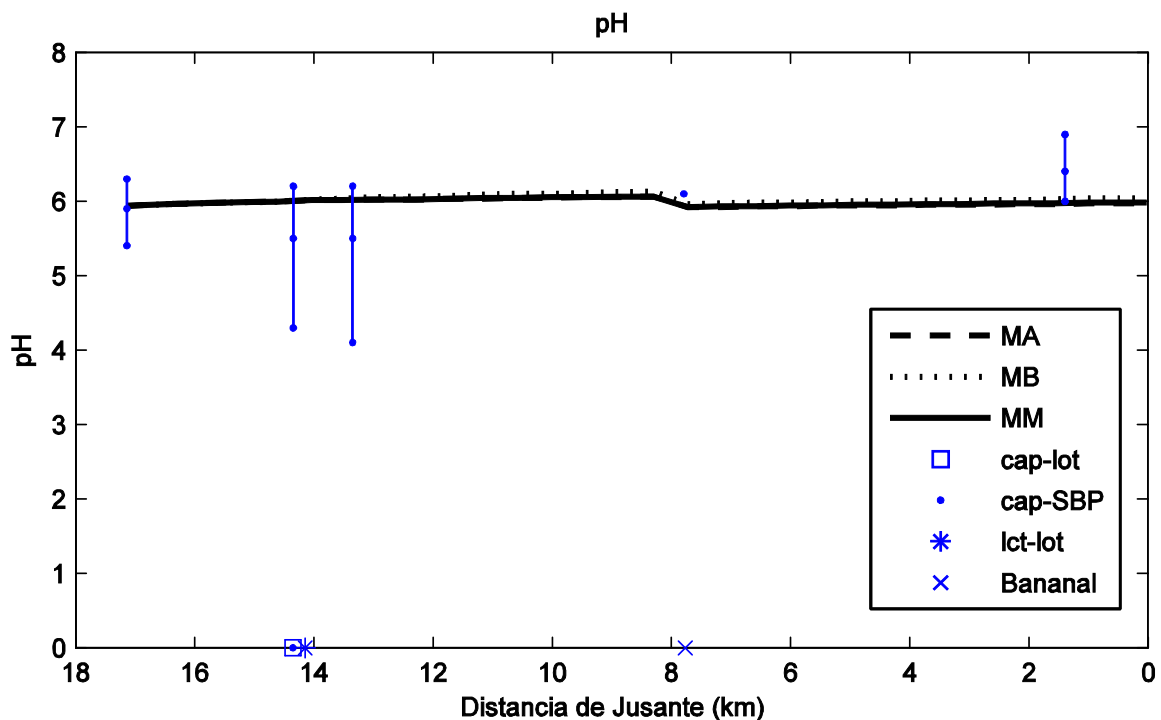


Figura 62 – Resultado da calibração para o pH.

Os resultados da calibração observados nas Figuras 56 a 62 quando comparadas em relação à média das observações apresentaram um bom ajuste, principalmente para o OD (Figura 56), DBO (Figura 57), NH_3 (Figura 58) e pH (Figura 62). Já para NO_3 , P_{total} e Clorofila-a os resultados foram razoáveis, principalmente para a última variável em função da grande quantidade de parâmetros necessários para calibrá-la e dos baixos valores registrados.

Entretanto, ao se analisar os dados observados nas três campanhas de uma forma geral, as curvas calculadas pelo modelo conseguiram permanecer entre essas observações, indicando que os coeficientes encontrados produzem resultados de qualidade de água que tem maior probabilidade de ocorrer nessa época chuvosa, período no qual se realizou a calibração.

5.5. Validação

As Figuras 63 e 64 apresentam os resultados da validação do modelo QUAL2Kw para período chuvoso e seco, respectivamente nos dias 03/01/07 e 30/05/07.

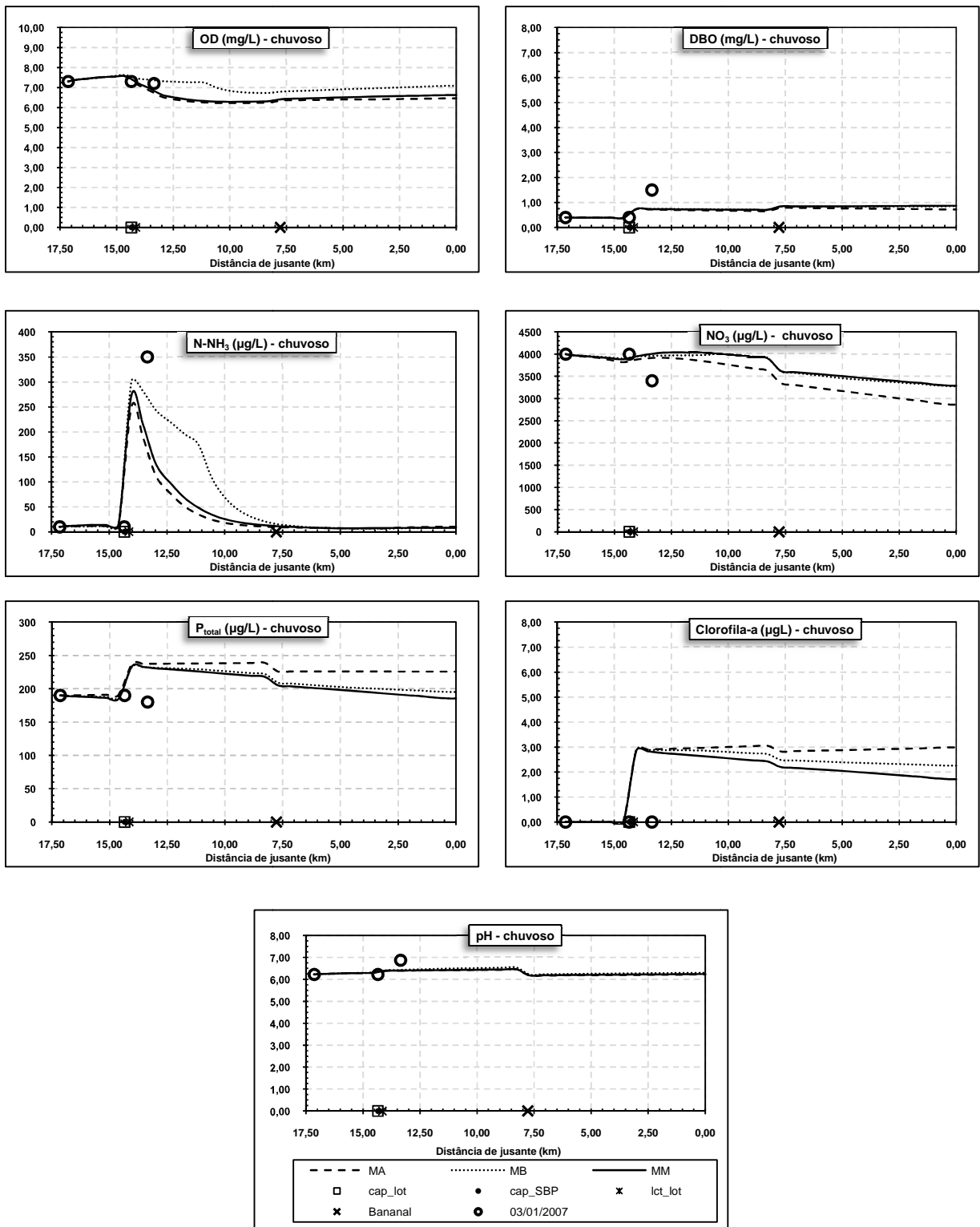


Figura 63 - Resultados da validação para período chuvoso (03/01/2007).

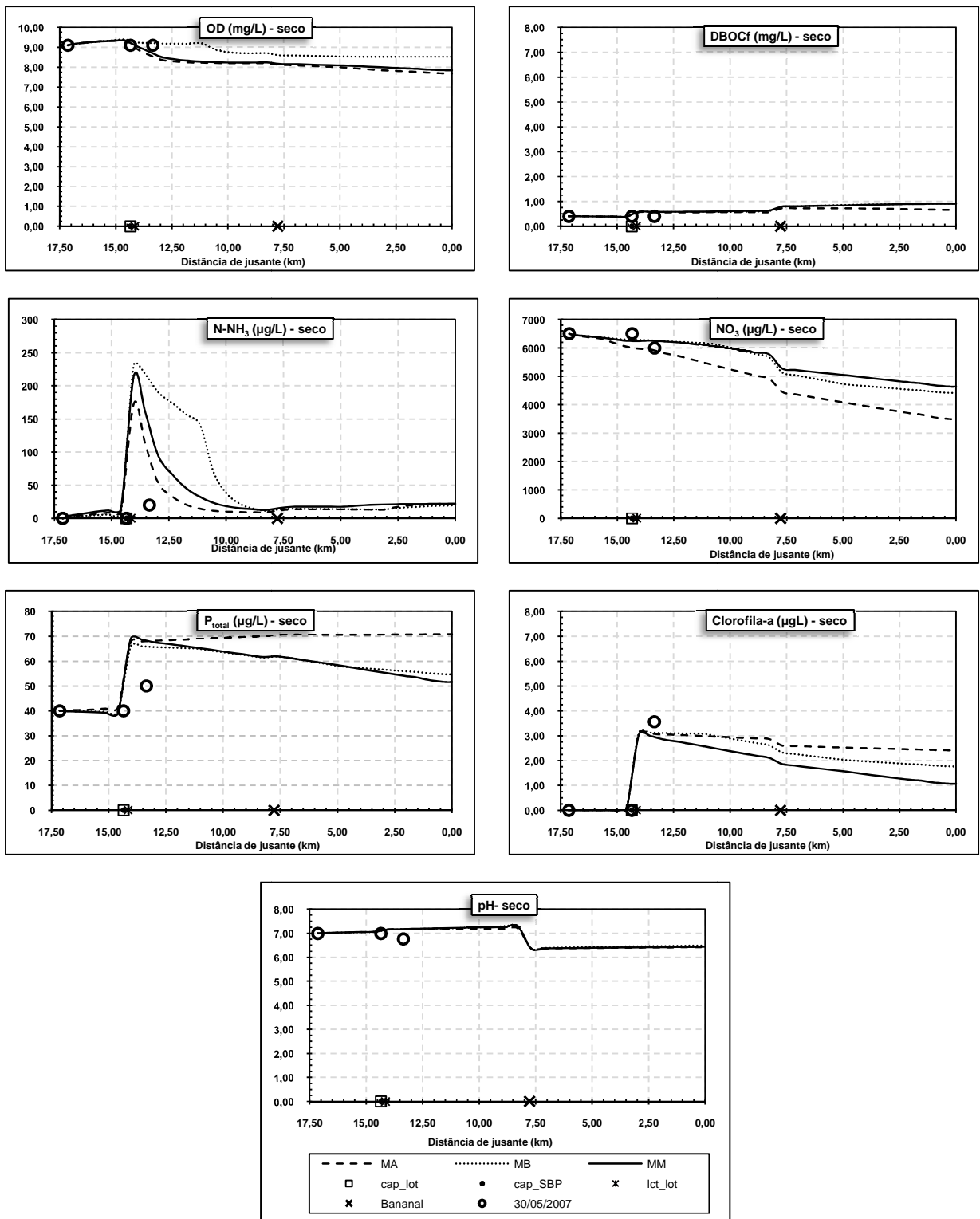


Figura 64 - Resultados da validação para período seco (30/5/2007).

Analisando os gráficos das Figuras 63 e 64 verifica-se que houve uma boa resposta do modelo QUAL2Kw para período seco e chuvoso, ao se utilizarem os mesmos parâmetros e coeficientes de descargas obtidos na calibração (Anexo B). A exceção fica por conta do NO_3 logo a jusante do lançamento do loteamento para período chuvoso; fósforo também no mesmo ponto, para ambos os períodos; NH_3 neste mesmo ponto em período seco e clorofila-a, na mesma coordenada, para período seco.

Entretanto, é importante salientar da necessidade de mais pontos de monitoramento, uma vez que só havia dados disponíveis em Q1, Q2 e Q3. Dessa maneira não foi possível avaliar em maiores detalhes se os coeficientes do QUAL2Kw precisam de algum ajuste a jusante de Q3. Ademais, existe uma incerteza associada aos dados de qualidade de água do Rio Bananal (L2) uma vez que se assumiram as médias das campanhas de 01/10/09, 05/11/09 e 17/12/09.

5.6. Apresentação das simulações dos respectivos cenários

Foram realizadas simulações contemplando três cenários, sendo o primeiro utilizando $Q_{95\%}$ do rio na estação chuvosa com as vazões de lançamento e captação do empreendimento que representam 5% daqueles registrados na mesma estação no período de janeiro de 2006 a dezembro de 2009.

Para a construção do segundo cenário usou-se o mesmo critério que no primeiro, porém com as vazões do rio, lançamento e captação para a estação seca. O terceiro cenário foi construído a partir da seleção das condições de nível d'água de jusante mais críticas com o aumento da vazão de lançamento e captação do loteamento em 50% para a estação hidrológica que produziu as condições mais desfavoráveis. Para o Rio Bananal (L2) foi utilizada a $Q_{95\%}$ para período chuvoso e $Q_{7,10}$ para período seco, ambas calculadas pela Regionalização de Vazões disponível no website do SIGRH.

Em relação às variáveis de qualidade de água para os cenários, tanto as condições na cabeceira (condição inicial) tanto a do lançamento, foram obtidas através da mediana de uma série de observações semanais de janeiro de 2006 a dezembro de 2009. A série de vazões registrada do lançamento é diária e a do Rio Itapanhaú é a

partir de uma média duas leituras diárias de 02/11/2006 a 31/10/2008. A Tabela 13 apresenta esses resultados para período seco e chuvoso.

Tabela 13 – Mediana das variáveis de qualidade de água e vazões de lançamento e captação com permanência de 95% para os períodos seco e chuvoso de janeiro de 2006 a dezembro de 2009.

Variável	Rio Itapanhaú		Lançamento (L1)		Lançamento (L2)	
	Período Seco	Período Chuvoso	Período Seco	Período Chuvoso	Período Seco	Período Chuvoso
Vazão (m ³ /s)	2,499	3,750	0,064	0,1273	0,224*	0,340
OD (mg/l)	8,30	7,6	2,83	0,46	7,40	7,40
DBO (mg/L)	0,5	0,5	13,50	21,50	2,41	2,41
pH	6,52	6,34	7,60	8,00	5,39	5,39
N-NH ₃ (µg/L)	20	20	4606	5544	0,00	0,00
NO ₃ (µg/L)	1600	2000	2710	3263	0,00	0,00
P _{total} (µg/L)	60	50	1092	1169	0,00	0,00
Clorofila-a (µg/L)	0,89	0,89	189,57	246,98	0,00	0,00

*Foi utilizado o Q_{7,10} calculado por regionalização como vazão mínima para o Rio Bananal no período seco.

Nos gráficos das Figuras 65 a 71 são apresentados os resultados das simulações para período chuvoso, enquanto que as saídas das simulações do período seco estão nos gráficos das Figuras 72 a 78.

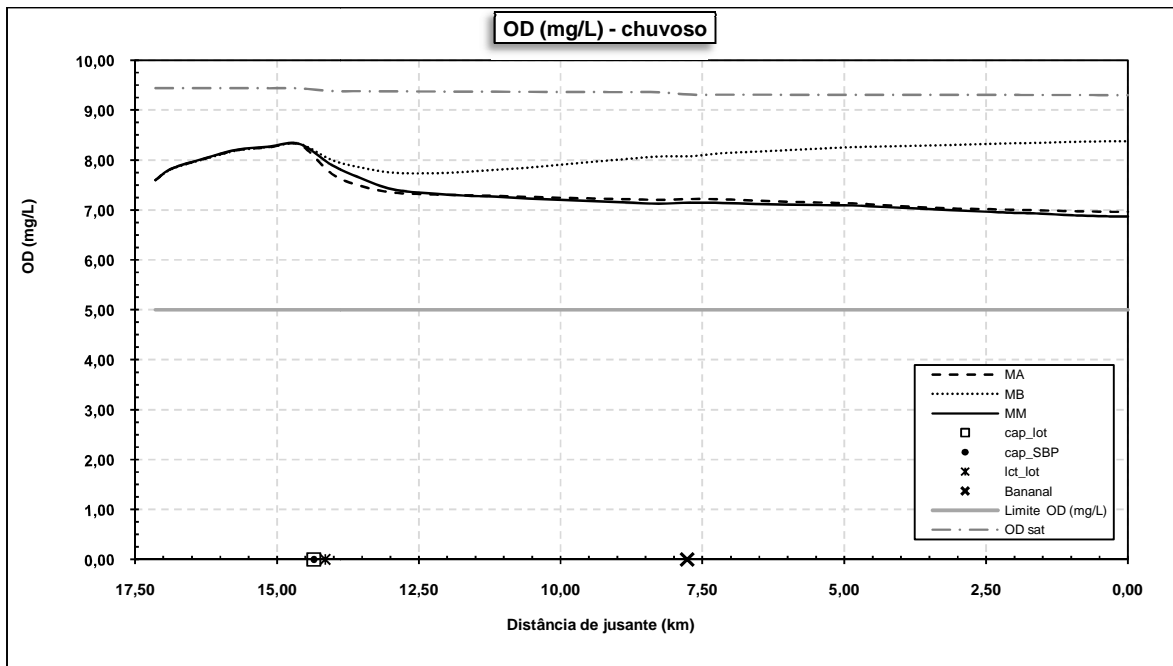


Figura 65 – Resultados das saídas de OD para período chuvoso.

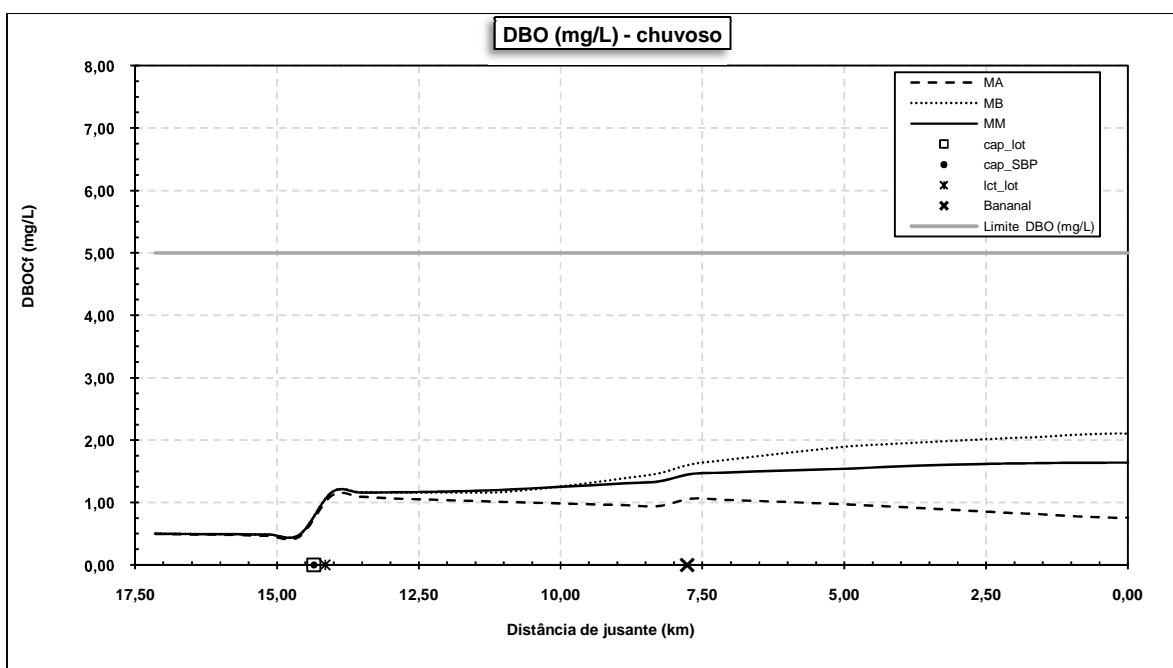


Figura 66 – Resultados das saídas de DBO para período chuvoso.

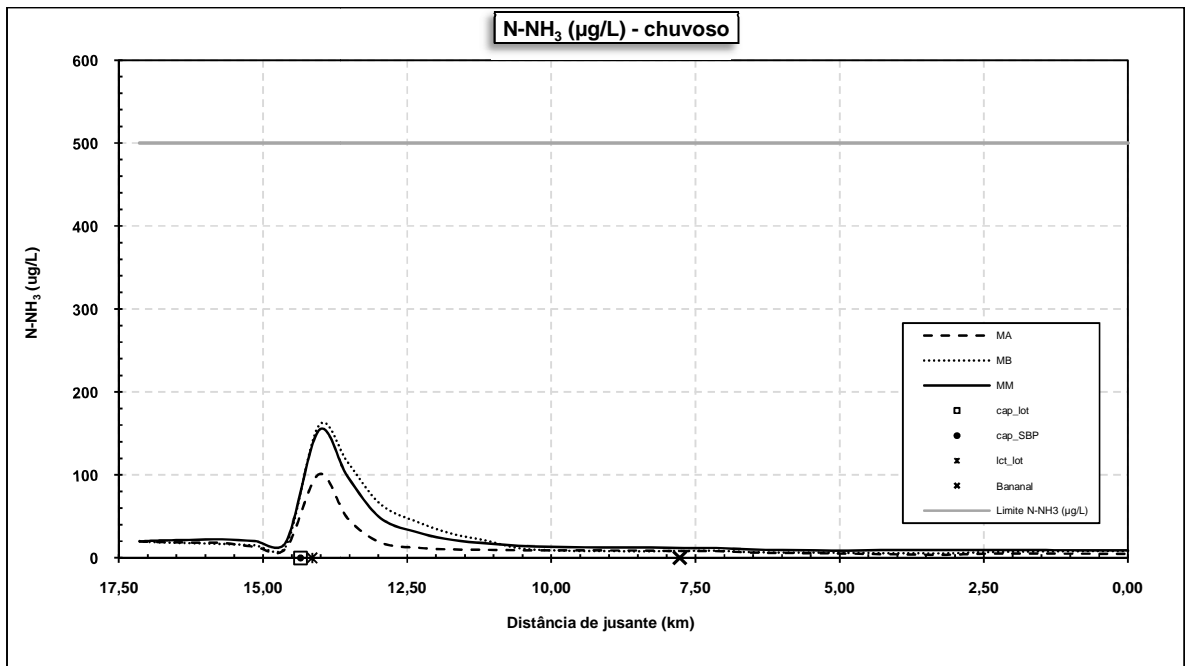


Figura 67 – Resultados das saídas de NH₃ para período chuvoso.

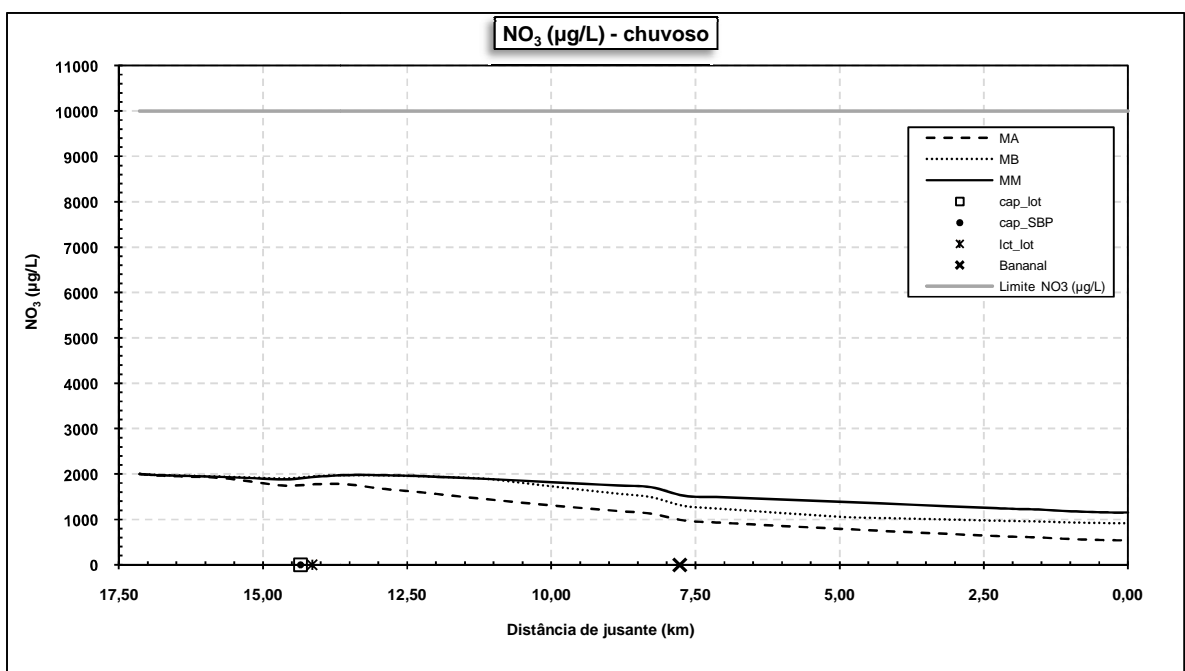


Figura 68 – Resultados das saídas de NO₃ para período chuvoso.

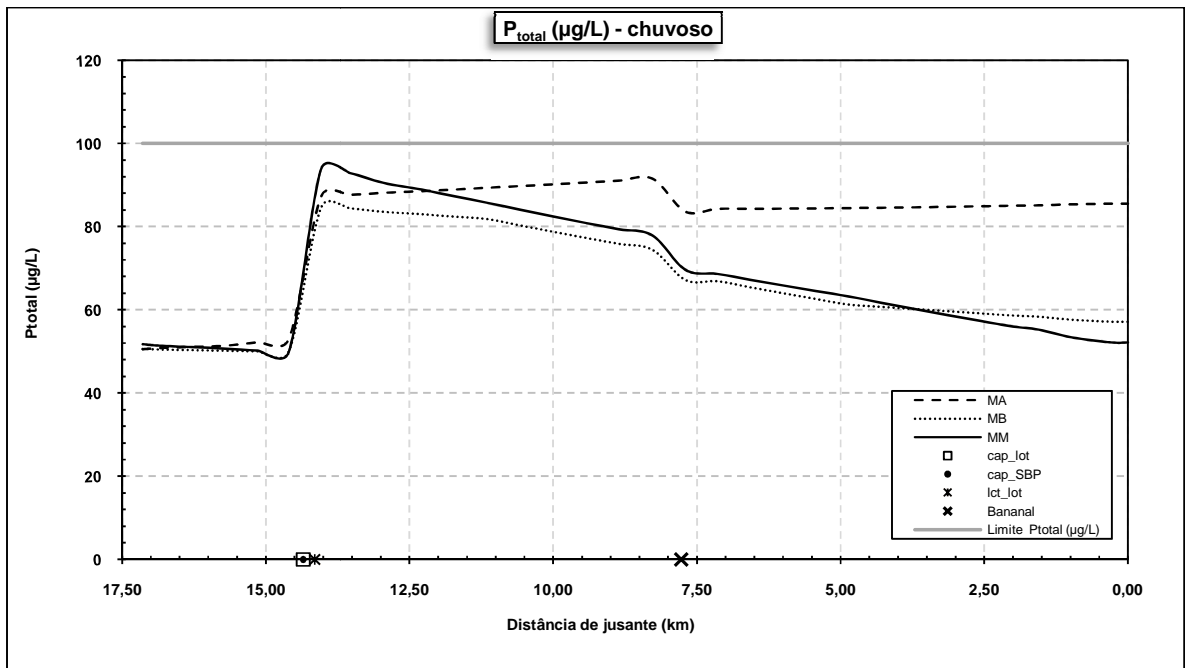


Figura 69 – Resultados das saídas de P_{total} para período chuvoso.

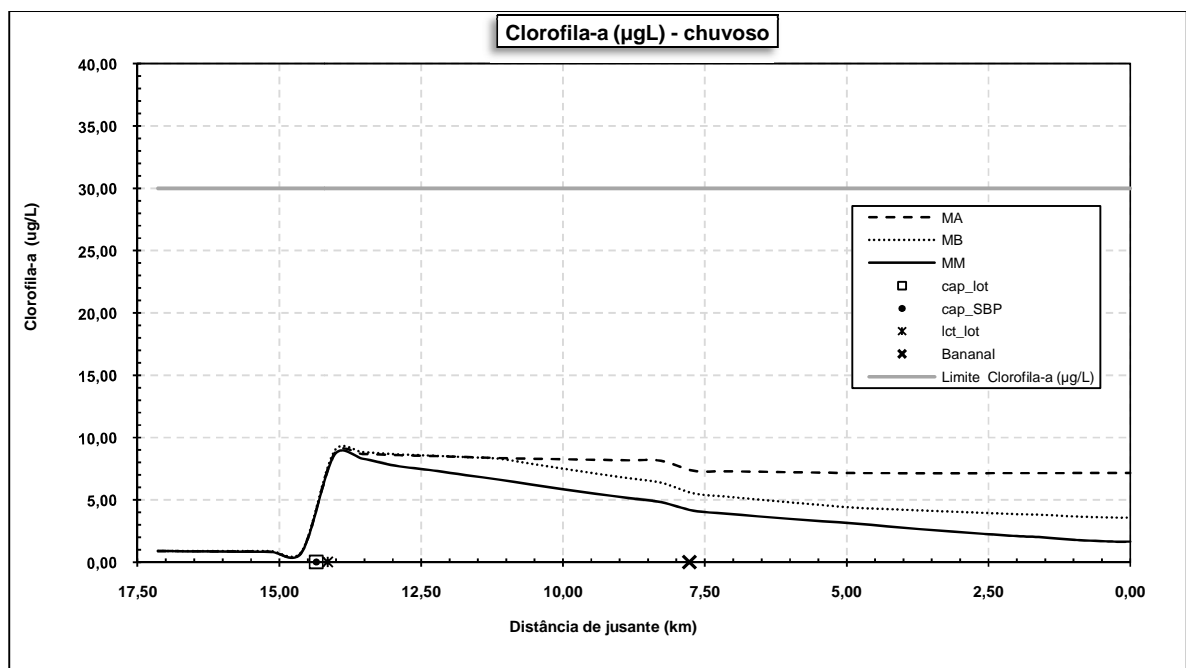


Figura 70 – Resultados das saídas de Clorofila-a para período chuvoso.

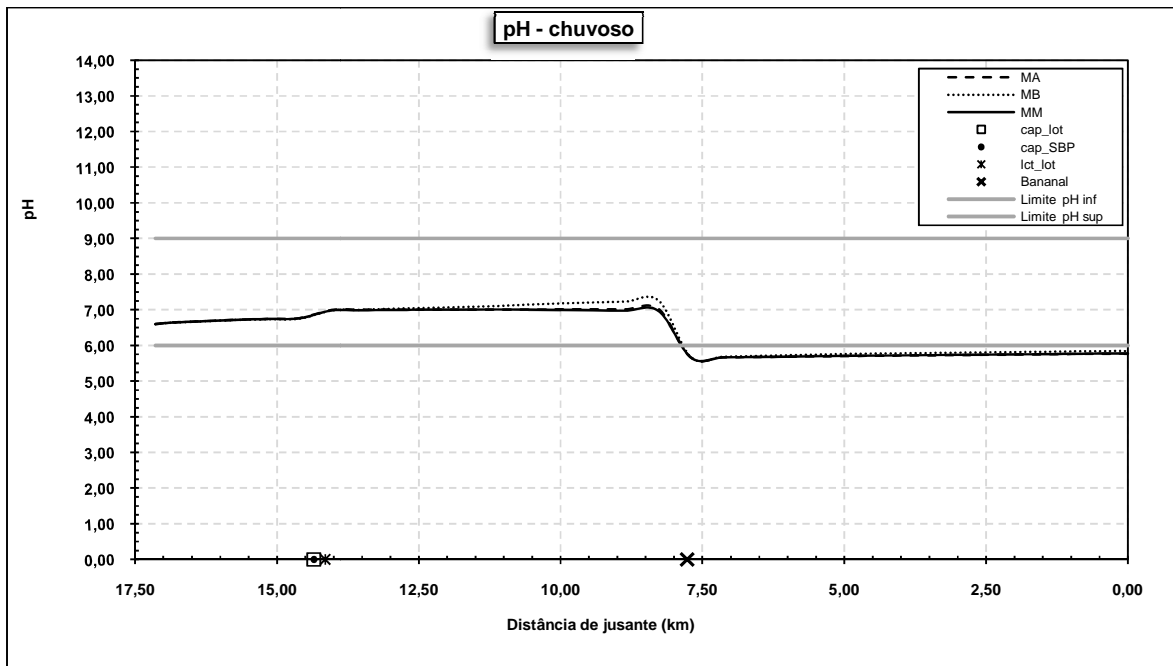


Figura 71 – Resultados das saídas de pH para período chuvoso.

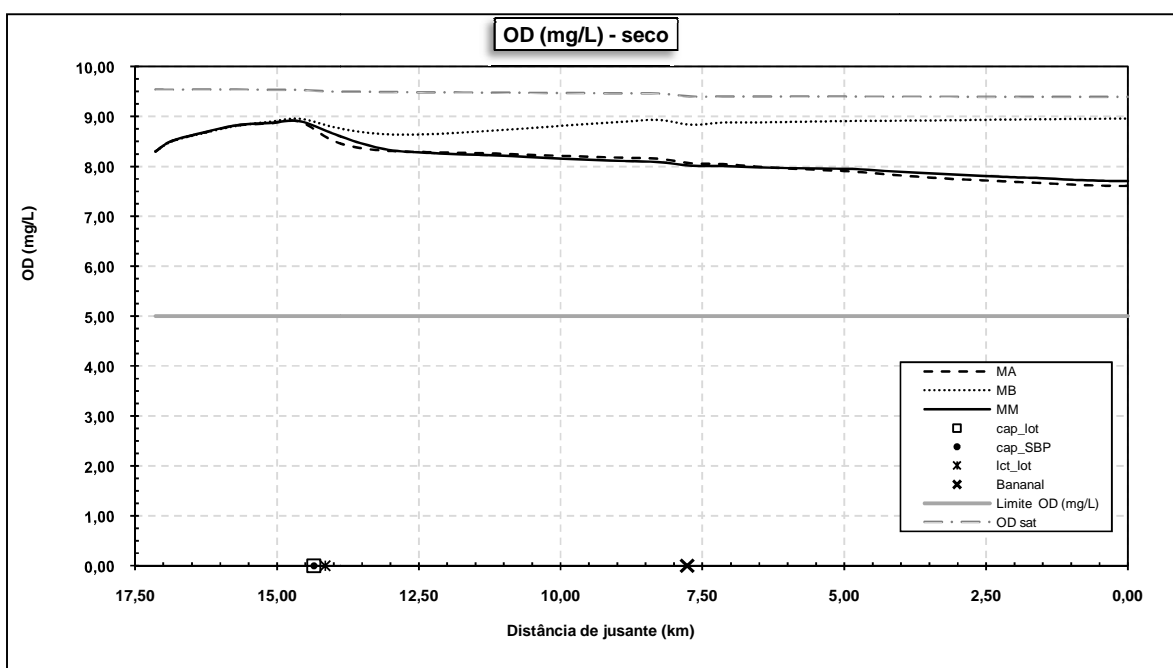


Figura 72 – Resultados das saídas de OD para período seco.

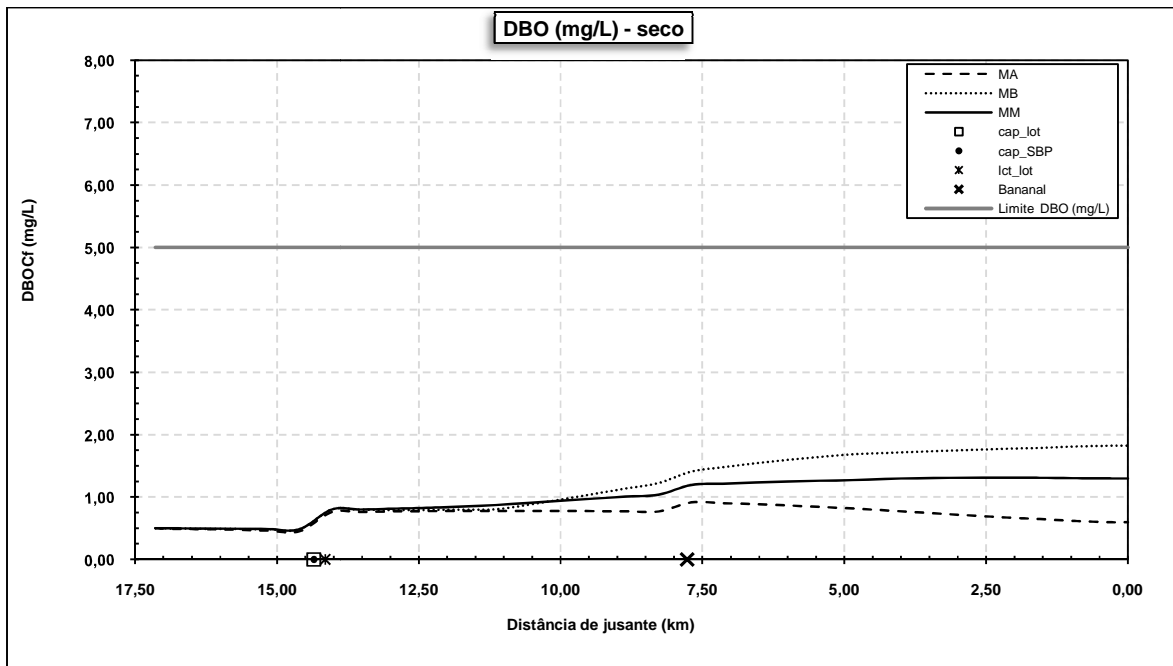


Figura 73 – Resultados das saídas de DBO para período seco.

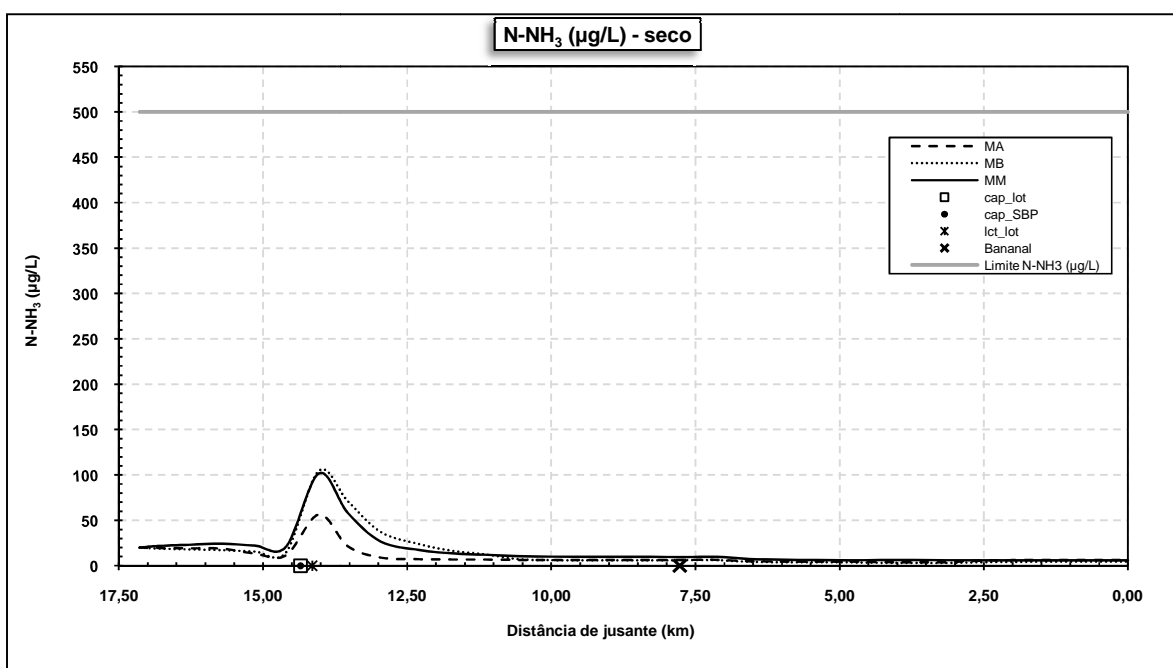


Figura 74 – Resultados das saídas de NH₃ para período seco.

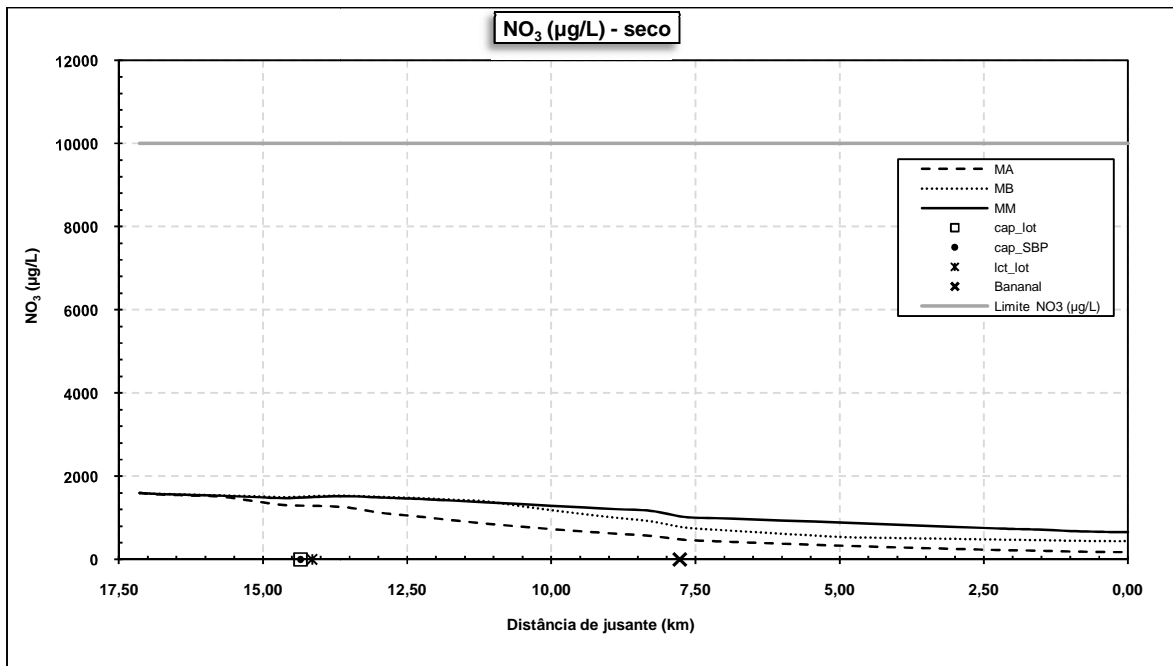


Figura 75 – Resultados das saídas de NO₃ para período seco.

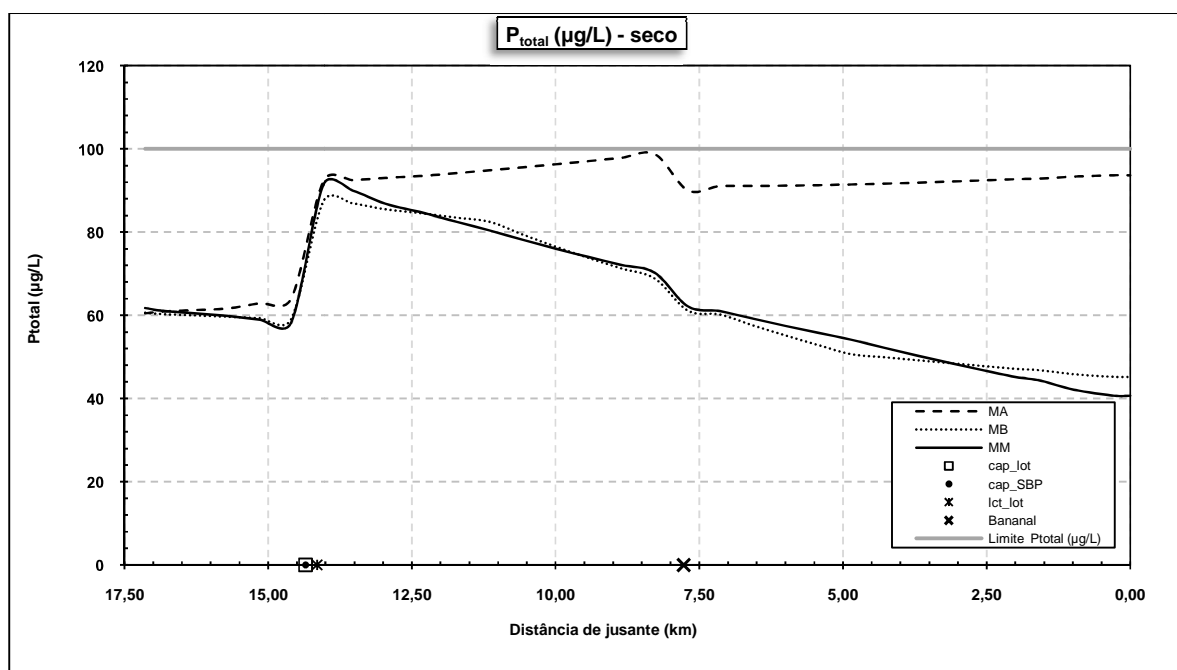


Figura 76 – Resultados das saídas de P_{total} para período seco.

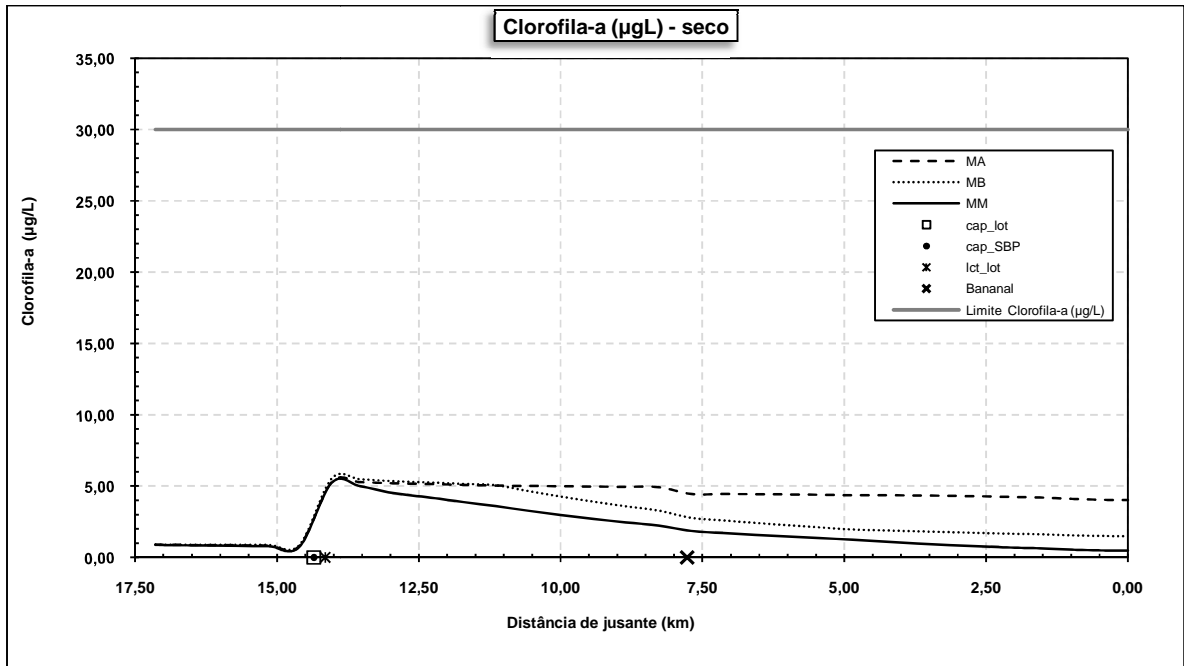


Figura 77 – Resultados das saídas de Clorofila-a para período seco.

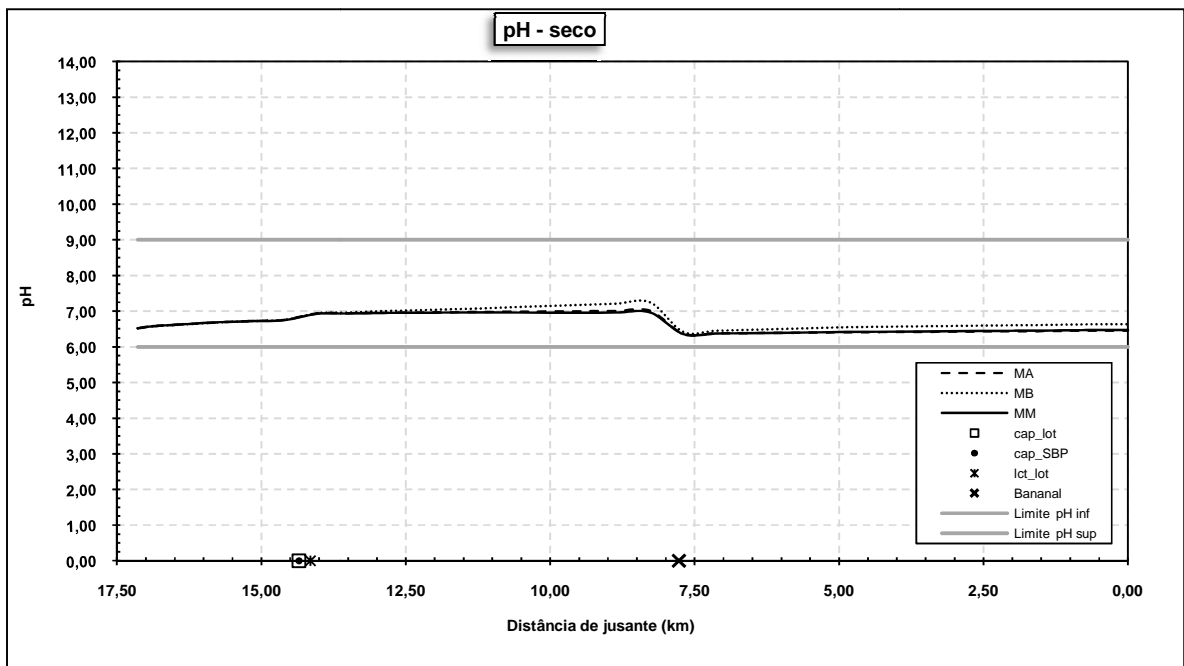


Figura 78 – Resultados das saídas de pH para período seco.

Analisando-se as saídas para período chuvoso, verifica-se que houve atendimento a todos os padrões de qualidade de água para rios classe 2 de acordo com a Resolução CONAMA 357/05 no trecho simulado. A exceção foi o pH, após o aporte do Rio Bananal (ponto Q3, km 7,77, pH 5,39) que apresentou valores de 5,60 a 5,80 do km 7,7 ao km 0 para todas as condições hidrodinâmicas. Ainda houve uma pequena elevação dessa variável para próximo de 7,00 logo após o lançamento L1 (km 14,15, Figura 71).

Em relação às condições de nível d'água de jusante também para período chuvoso, é possível observar que as concentrações de OD foram maiores na maré baixa em função da maior reaeração (Figura 65). Tal fato pode ser explicado em função da maior velocidade e menor profundidade, conforme as equações de reaeração adotadas pelo QUAL2Kw e apresentadas em anexo (A-125 a A-137), confirmando os resultados de velocidade e profundidade apresentados nas Figuras 49 e 50. Em todas as marés observou-se a curva característica de decréscimo do OD, porém apenas na maré baixa houve a recuperação. Lançamentos futuros nesse trecho de jusante nessas outras condições de nível podem provocar não conformidades em relação ao padrão de qualidade.

A DBO em período chuvoso também apresentou resultados diferentes para as diferentes condições de jusante, sendo que na maré baixa após o km 2,50 os resultados ficaram acima de 2 mg/L (Figura 66). Para todas as condições houve um aumento imediato após o lançamento do loteamento e foi observado que nas marés média e baixa a tendência da concentração dessa variável é ascendente, enquanto que na maré alta ela é descendente.

A amônia total (Figura 67) sofreu um aumento significativo após o lançamento no período chuvoso para todas as condições de maré, sendo que na maré alta o pico das concentrações atingiu 100 µg/L e na maré baixa e média atingiu 153 µg/L. O limite lançado no gráfico de 500 µg/L foi correspondente ao pH acima de 8,5 por razões de visualização do gráfico, sendo que o limite para o pH observado das simulações foi sempre inferior a 7,5 onde o limite é de 3.700 µg/L pela Resolução CONAMA 357/05

para rios classe 2. Em relação ao nitrato, os resultados obtidos (Figura 68) ficaram sempre abaixo de 2.000 µg/L, não sofrendo acréscimo em função do lançamento uma vez que a concentração dessa variável no efluente tratado foi de 3.263 µg/L.

Fósforo total e Clorofila-a para período chuvoso (Figuras 70 e 71, respectivamente) apresentaram comportamento semelhante, com um sensível acréscimo após o lançamento (L1). Verificam-se para ambas as variáveis que a condição de maré alta é mais crítica uma vez que não há decaimento das concentrações.

Já para os resultados das simulações em período seco, também não houve nenhuma situação de concentrações em desatendimento em relação à CONAMA 357/05.

Observou-se, nesse período, resultados de OD (Figura 72) maiores que em período chuvoso, sendo que também houve um melhor comportamento na maré baixa pelas mesmas razões de maiores velocidades e menores profundidades. Para nível médio e alto em jusante o OD permaneceu descendente, porém sempre superior a 7,80.

O comportamento da DBO em período seco (Figura 73) foi semelhante ao período chuvoso, inclusive em valores. A maré baixa apresentou a situação mais crítica, com resultados ascendentes e próximos a 2 mg/L.

Para a amônia em período seco (Figura 74) os resultados foram maiores para maré baixa e média, com o pico após o lançamento em 100 µg/L. Na maré alta a concentração foi menor, não superando 55 µg/L.

O nitrato em período seco (Figura 75) teve comportamento semelhante ao período chuvoso, com valores descendentes sempre abaixo de 2.000 µg/L, sem sofrer aumentos em função dos lançamentos L1 (efluente) e L2 (Rio Bananal).

As concentrações de fósforo total em período seco (Figura 76) sofreram uma elevação significativa após o lançamento do loteamento, com uma situação crítica verificada na maré alta que só passa a diminuir após a desembocadura do Rio Bananal no km 7,77. Para as marés média e baixa o fósforo foi consumido ao longo do trecho simulado.

A clorofila-a para período seco (Figura 77) sofreu um acréscimo logo a jusante do lançamento L1 e manteve uma tendência descendente ao longo do trecho simulado, com exceção para a situação de maré alta onde a concentração ficou estável em torno de 4,80 µg/L.

Já para o pH em período seco (Figura 78) não houve valores abaixo de 6,00 como ocorrido em período chuvoso provavelmente em função da menor vazão simulada do Rio Bananal de 0,224 m³/s, enquanto que no período úmido foi utilizado 0,340 m³/s.

Portanto, o período chuvoso foi onde ocorreram as situações mais críticas e, então, se realizaram novas simulações para um aumento de 50% na vazão de captação e lançamento do efluente do loteamento. Os gráficos da Figura 79 apresentam os resultados dessas simulações.

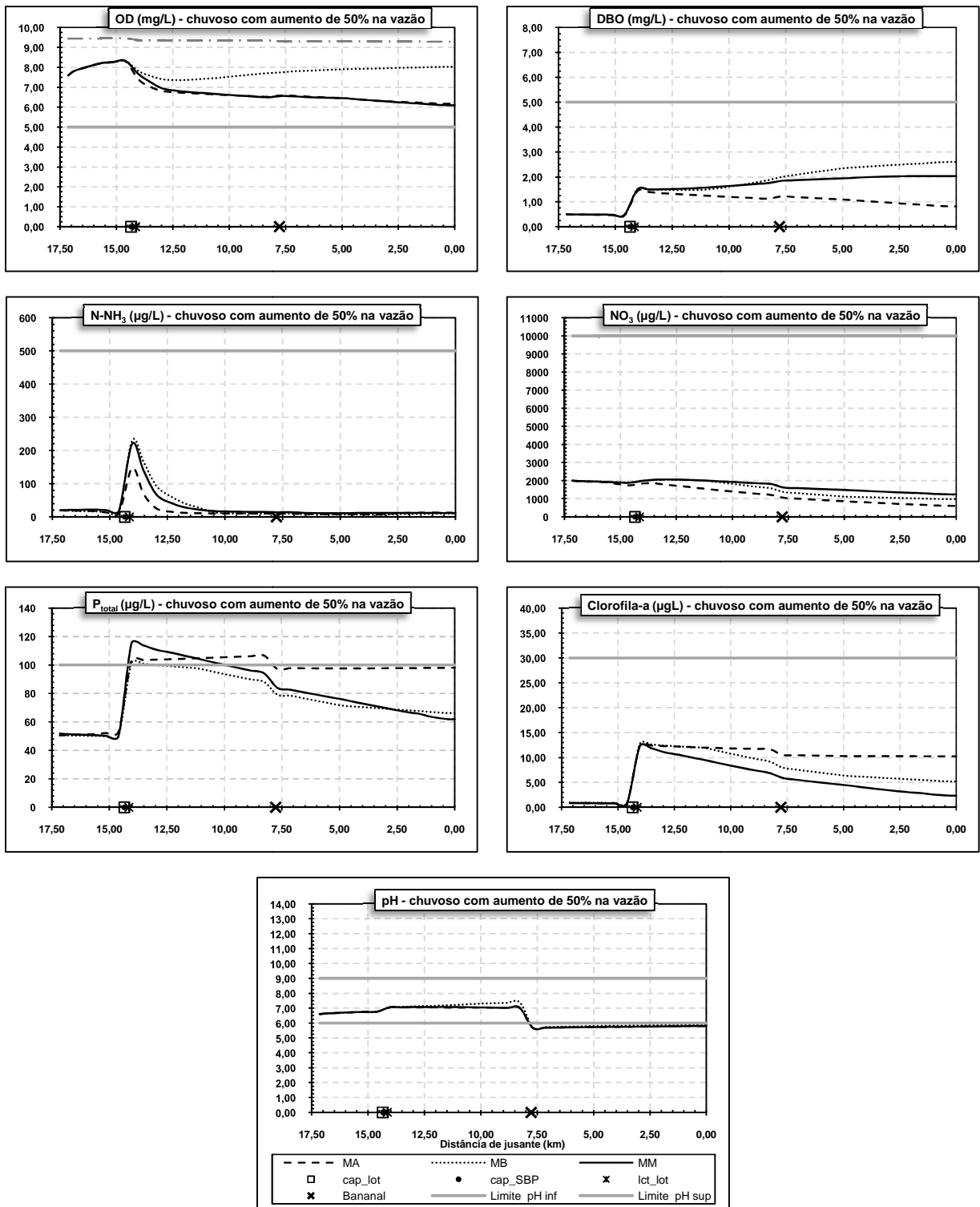


Figura 79 – Saídas do QUAL2Kw para aumento de 50% nas vazões de captação e lançamento do loteamento.

No cenário de aumento de 50% nas vazões de captação de água e lançamento do efluente tratado do loteamento, ainda verifica-se que o trecho simulado permanece em conformidade com os limites preconizados na Resolução CONAMA 357/05, com exceção do fósforo total desde esse despejo até o km 7,50 aproximadamente.

Tanto OD quanto DBO sofreram aumento e decréscimo de cerca de 1mg/L nas proximidades de Q6, respectivamente. Novamente a situação de maré baixa apresentou maiores concentrações dessas duas variáveis.

5.7. Análise da incerteza

No sentido de avaliar o resultado de OD no km 1,51 para maré alta no período chuvoso de forma probabilística, utilizou-se a simulação Monte Carlo realizada através do suplemento YASAIw para Excel acoplado ao modelo QUAL2Kw, disponível em <http://www.ecy.wa.gov/programs/eap/models.html> e desenvolvido por Eckstein e Riedmueller (2009).

Para tanto, variou-se o OD, DBO e NH_3 no rio, além das vazões do Itapanhá e Bananal. Também foram alterados o coeficiente de reaeração (K_{ah}) e a taxa de nitrificação (K_{na}) de cada trecho, todos dentro de uma distribuição lognormal. O QUAL2Kw foi rodado 1000 vezes e os resultados são apresentados na Figura 80.

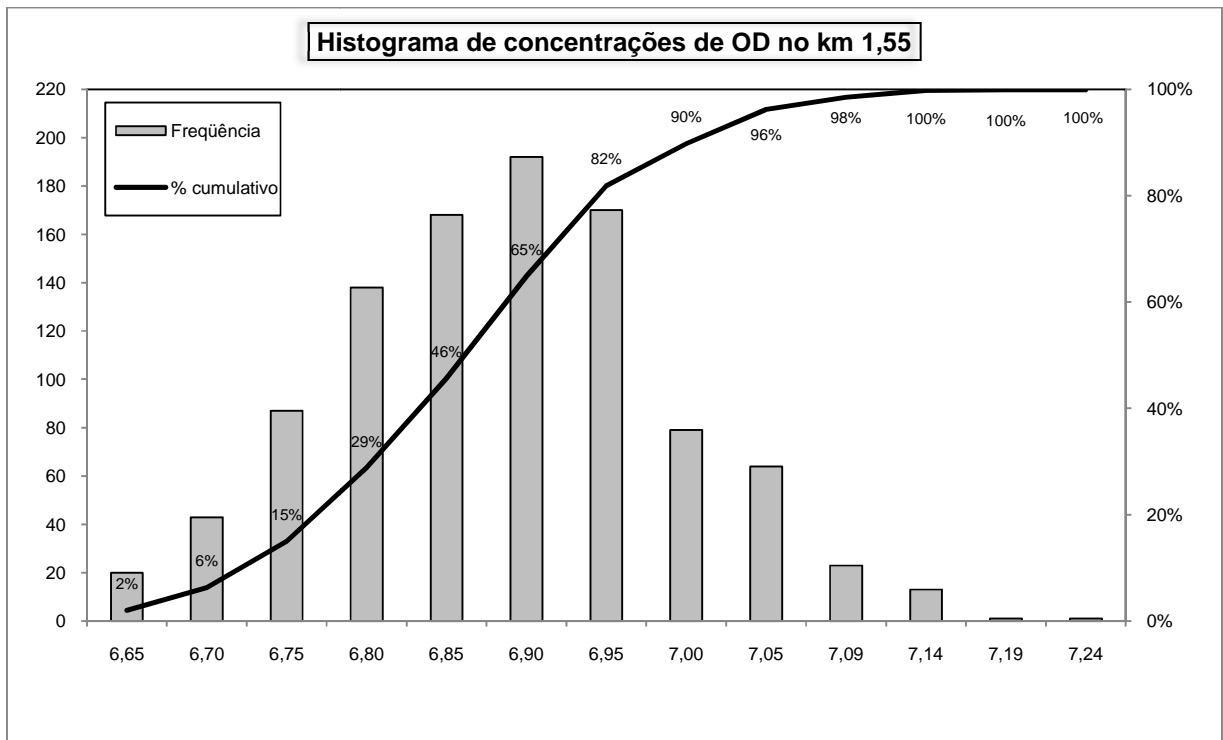


Figura 80 – Histograma de concentrações de OD no km 1,51 para maré alta no período chuvoso.

Assim, ao invés de se apresentar um resultado determinístico (6,92 mg/L, como foi apresentado no gráfico de OD da Figura 65) e incorporando a incerteza da medição de cada um dos parâmetros selecionados do modelo e executar um número grande de simulações, tem-se que apenas 2% dos dados (20 simulações) resultaram em OD menores ou iguais a 6,65 mg/L. Foi utilizado um desvio padrão de 10% da média para as vazões e 30% para os demais parâmetros.

5.8. Análise de sensibilidade

A Figura 81 apresenta os resultados 1000 simulações Monte Carlo para as variáveis OD no km 1,55, NH₃ no km 14,03 e P_{total} no km 13,53, variando-se os parâmetros K_{ah}, K_{na} e K_{hp} (taxa de hidrólise do fósforo orgânico) segundo distribuições lognormais com o desvio padrão estimando em 30% do valor da média, garantindo assim uma grande faixa de valores. O critério utilizado foi a seleção dos valores dos

parâmetros que geraram os 50% valores menores das variáveis para uma amostra e a seleção dos outros 50% valores maiores para a outra amostra.

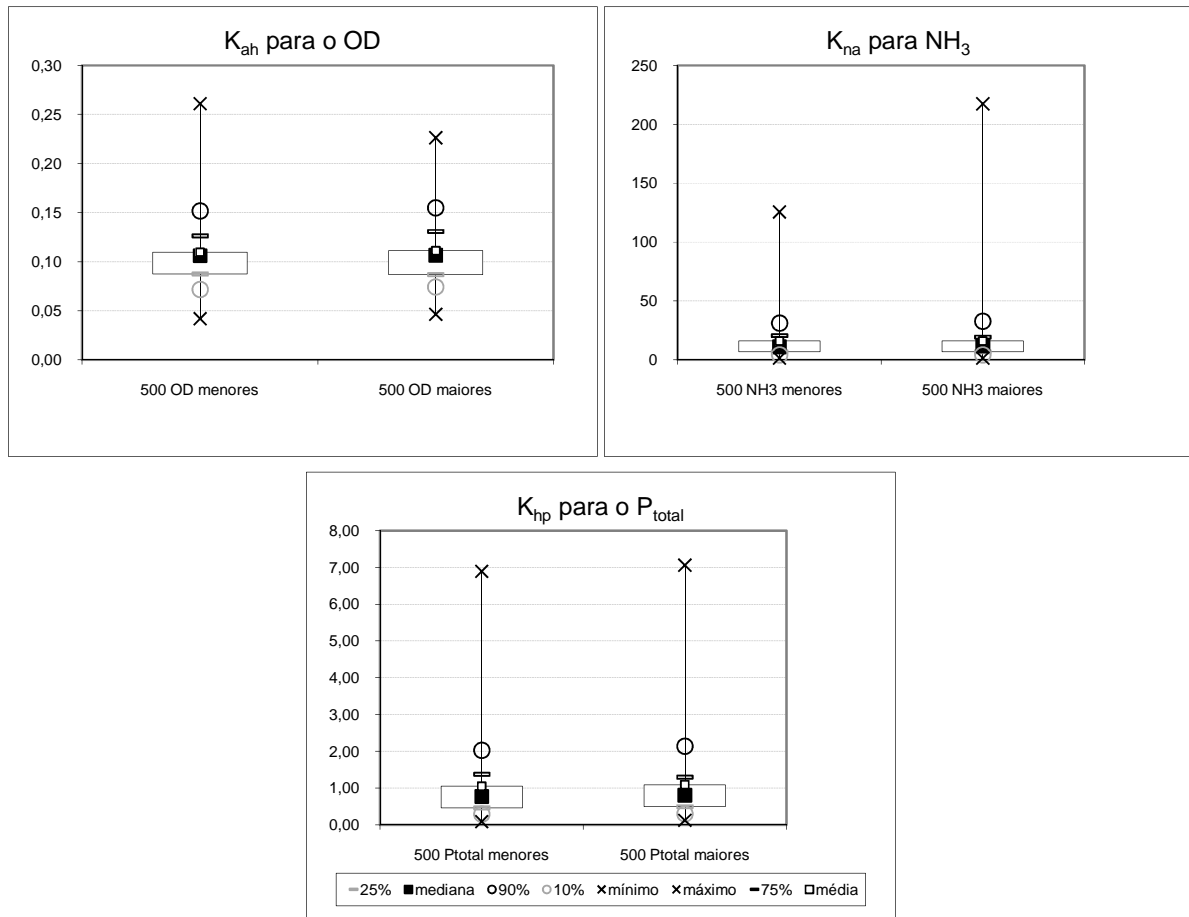


Figura 81 – Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_{ah} , K_{na} e K_{hp} .

Através de análise visual é possível afirmar que não há diferenças significativas entre as duas amostras, para todos os parâmetros. Realizou-se também um teste não paramétrico “t” e verificou-se que não há diferenças entre as médias das duas amostras com significância de 5%.

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Após a realização das simulações é possível afirmar que, a partir da determinação das condições hidrodinâmicas com o CLIV para diferentes condições de nível d'água de jusante, o modelo QUAL2Kw apresentou-se como uma ferramenta adequada para a simulação de lançamentos pontuais no Rio Itapanhaú.

Entretanto, em função da superparametrização desse modelo e da ausência de medições dos seus coeficientes, faz-se necessário comparar seus resultados com modelos mais simples e ainda realizar estudos de análise de incerteza e sensibilidade mais aprofundados. Essas investigações permitiriam definir quais coeficientes são mais sensíveis às simulações e, portanto, poder-se-ia investir maiores recursos na sua determinação e diminuir a incerteza dos resultados.

Em função de boa parte do rio em análise sofrer interferência do nível d'água de jusante, principalmente a partir do ponto Q2, fez-se necessária a simulação das condições hidrodinâmicas em regime transitório a partir da determinação dos parâmetros de maré para o ponto final da modelagem. Sem essa abordagem não haveria uma determinação de condições críticas conforme ocorrido com o fósforo total durante as marés altas nos dois períodos hidrológicos. Portanto, foi possível verificar a que as condições de nível d'água de jusante, em função das marés, afetam a qualidade da água a montante uma vez que as velocidades diminuem e as profundidades aumentam nas marés altas e o inverso nas marés baixas.

O modelo fora calibrado para três condições de nível d'água de jusante: maré alta, média e baixa para período seco e chuvoso. Como não havia dados para calibração em período seco, foram utilizados os mesmos parâmetros de período chuvoso gerando uma incerteza nas simulações de estiagem. A validação foi realizada para período seco e chuvoso, porém a verificação da robusteza em diferentes condições hidrológicas foi limitada devido à escassez de dados ao longo do rio.

Os cenários mais críticos observados ocorreram no período chuvoso, uma vez que o OD no rio é menor que no período seco provavelmente em função da maior

temperatura da água no verão. Ademais, o volume de efluente lançado nessas épocas é cerca de duas vezes maior que no período seco, inclusive com OD menor.

É importante salientar que a viabilização de licenças e outorgas de lançamento de efluentes e captações deve considerar a sazonalidade da região, bem como a sua sincronia com os períodos secos e chuvosos.

Apesar de realizada apenas para o OD em período chuvoso, a análise da incerteza por simulação Monte Carlo mostrou que é possível apresentar os resultados em forma probabilística, ou seja, é possível conhecer o risco assumido que é desconsiderado pela abordagem determinística.

Os resultados obtidos e a metodologia utilizada podem fomentar a tomada de decisão em relação ao uso dos recursos hídricos no trecho estudado. Apesar da complexidade nas simulações ao envolverem-se dois modelos, um hidrodinâmico e outro de qualidade de água, além da determinação das amplitudes e fases das constantes harmônicas, a análise apresentada no presente trabalho pode ser replicável a estudos futuros envolvendo rios de maré.

7. RECOMENDAÇÕES

- Calibrar e validar o cálculo dos níveis d'água com observações reais, uma vez definidas a fase e a amplitude de cada componente harmônica principal transportada da relação apresentada pela FEMAR na Ilha Barnabé;
- Determinar a curva de permanência do nível d'água de jusante com a finalidade de se conhecer a probabilidade da ocorrência dos eventos críticos. Com esse estudo seria possível prever exatamente as horas e os dias em que as condições de diluição são mais adversas para cada variável de qualidade de água, como exemplo o fósforo total nas marés altas;
- Calibrar o QUAL2Kw para período seco;
- Ampliar o monitoramento ao longo do Rio Itapanhaú no sentido de obter uma melhor validação para o QUAL2Kw em período seco e chuvoso. Seria ainda importante realizar as simulações em um trecho mais longo do rio até a desembocadura com o mar, que não foi realizado nesse trabalho em virtude dos recursos disponíveis para análises laboratoriais;
- Estimar a carga difusa nos trechos a jusante do ponto Q4, onde as margens do Rio Itapanhaú passam a ser ocupadas por sub-habitações;
- Prosseguir com os registros de vazão no sentido de se construir uma curva de permanência com menor risco em função do atual tamanho da série de observações (2 anos). Paralelamente a isso, poder-se-ia calibrar e validar o CLIV com tais registros de nível d'água;

- Realizar comparações entre outros modelos mais simples, como o QUAL-UFMG, QUAL2E e o próprio modelo de Streeter-Phelps. No caso da simulação até a desembocadura com o mar far-se-ia necessário o uso de modelos bidimensionais ou tridimensionais específicos para estuários.

8. BIBLIOGRAFIA

APHA – American Public Health Association. (2005). **Standart Methods of the Examination of Water and Wastewater**. 21^a edição, Washington, DC.

Bottino, F. (2008) “**Estudo Experimental e Matemático de Qualidade de Água com Base na Ecohidrologia Fluvial de Pequenas Bacias: Estudo de Caso do rio Canha, Baixo Ribeira do Iguape, SP**”. Dissertação (Mestrado em Hidráulica e Saneamento), Escola de Engenharia de São Carlos/USP, São Paulo. 208 p.

Braga, B.; Hespanhol, I., Conejo, J. G. L., Barros, M. T. L., Spencer, M., Porto, M., Nucci, N., Juliano, N., Eiger, S. (2003). **Introdução à Engenharia Ambiental**. Prentice Hall, São Paulo – SP. 305 p.

Brown, L., Barnwell, T.O., Jr., (1987). **The Enhanced StreamWater Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and User Manual**. Report EPA/600/3-87/007. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA.

Carvalho, R. C. (2005). **Análise Matemática de Investimentos em Processos de Despoluição de Bacias Hidrográficas**. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

CETESB (1978). **Norma L5-169: Determinação de Oxigênio Dissolvido em águas – Método de Winckler modificado pela azida sódica**.

CETESB (1990). **Norma L5-306: Determinação de Pigmentos Fotossintetizantes Clorofila-A, B e C e Feofitina-A**.

CETESB (1991). **Norma L5-120: Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) – Método da diluição e incubação (20° C, 5 dias)**.

CETESB (1993). **Norma L5-123:Determinação da Condutividade – Método do condutivímetro.**

CETESB (1998). **Guia de Coleta e Preservação de Amostras de Água.** Secretaria Especial do Meio Ambiente do Ministério da Habitação, Urbanismo e Meio Ambiente (SEMA), São Paulo, 1ª edição, 149p.

CETESB (2007). **Norma L5-406:Coliformes Fecais – Determinação em amostras de água pela técnica de tubos múltiplos com o Meio A1.**

Chaminda, G. G. T., Aramaki, T., Amarasekara, T., Herath, G. B. B., Babel, M. S. (2007). **“Modeling and Assessment of Water Quality in the Kelani River, Sri Lanka”.** Southeast Asian Water Environment, 91-98.

Chapra, S. C. (1997). **Surface Water Quality Modelling.** ECB/McGraw-Hill. 844p.

Chapra, S. C. (2003). **“Engineering Water Quality Models and TMDLs”.** Journal of Water Resources Planning and Management, ASCE, 129, pp. 247 – 256.

Chow, V. T. (1959). **Open Channel Hydraulics.** New York, McGraw-Hill, 680p.

CONAMA (2005). **Resolução CONAMA 357/05.** Brasília, DF.

Di Toro, D.M. (2001). **Sediment Flux Modeling.** Wiley-Interscience, New York, NY.

Eckstein, J., Riedmueller S., T. (2009). **YASAI: Yet Another Add-in for Teaching. Elementary Monte Carlo Simulation in Excel.** INFORMS Transactions on Education 2:2 (12-26).

Fadiga, F. M. Jr. (1999). **Critério hidráulico para dimensionamento de transições em canais operando em regime fluvial**. Tese de Doutorado pela Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 124 p.

Fan, C., Wang, W., Liao, M. (2007). **“Impact of Tidal Effects on Rivers Running Through Urban Area – A Case Study in Northern Taiwan”**. Environmental Informatics Archives, Volume 5, pp. 409-414.

Fan, C., Ko, C., Wang, W. (2009). **“An Innovative Modeling Approach Using QUAL2K and HEC-RAS Integration to Assess the Impact of Tidal Effect on River Water Quality Simulation”**. Journal of Environmental Management, 90, pp. 1824-1832

Franco, A.S. (1998). **“Tides - fundamentals, analysis and prediction”** – 2ª Edição. FCTH, São Paulo, 249 p.

Guedes, H. A. S. (2009). **Modelagem da qualidade da água e da capacidade de autodepuração do Rio Pomba**. Dissertação (Mestrado em Recursos Hídricos e Ambientais). Engenharia Agrícola. Universidade Federal de Viçosa. Minas Gerais. 148 pp.

HACH (2008). DR 5000 - Manual do Usuário. DOC 022.90.00654. 2ª edição.

Holland, J. H. (1975). **Adaptation in Natural and Artificial Systems: Na Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence**. Ann Arbor, MI: University of Michigan Press.

IBGE – Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. **IBGE MI-2795-1/3, MI-2794-2 e MI-2794-4**.

Jordão, E. P., Pessôa, C. A. **“Tratamento de Esgotos Domésticos”**. 4ª edição, 2005, 906p.

Kannel, P. R., Lee, S., Kanel, S. R.; Lee, Y-S, Pelletier, G. J. (2007). “**Application of Automated QUAL2Kw for Water Quality Modeling and Management in the Bagmati river, Nepal**”. *Ecological Modelling*, 202, pp. 503-517.

Kondageski, J., H., (2008). “**Calibração de Modelo de Qualidade da Água para o Rio Utilizando Algoritmo Genético**”. Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, da Universidade Federal do Paraná.

Lacerda, E. G. M. de; Carvalho, A. C. P. L. F. de. (1999). **Introdução aos algoritmos genéticos**. In: Galvão, C. de O.; Valença, M.J.S. (orgs.). *Sistemas inteligentes: aplicações a recursos hídricos e ciências ambientais*: Porto Alegre: Ed. Universidade/UFRGS, 1999. p. 88-148.

Leonardi, R. (2002). “**Produção de Mapas de Anisotropia da Radiação Cósmica de Fundo em Microondas Utilizando um Algoritmo Genético**”. Dissertação de Mestrado em Astrofísica, INPE.

Lindenschmidt, K.E. (2006). “**The effect of complexity on parameter sensitivity and model uncertain in river water quality modeling**”. *Ecological Modeling* 190, pp 72–86.

Marsili-Libelli, S., Giusti, E. (2008). “**Water Quality Modeling for Small River Basins**”. *Environmental Modelling & Software*. 23, pp. 451 – 463.

Martins, J. R. S. (2008). Nota Técnica. **Joinville Plano Diretor de Drenagem Urbana Estimativa de Níveis Extremos de Maré**. Trabalho não publicado.

Martins¹ J. R. S. (2008). Notas de aula da disciplina Hidráulica Fluvial.

Martins, R. H. O. (1998). **“Carga Difusa em Ambientes Urbanos: A Bacia Representativa do Córrego do Mandaqui”**. Tese de doutorado apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

Masato, K. (2003). **“Conceitos de Zona Ripária e seus Aspectos Geohidrobiológicos”**. I Seminário de Hidrologia Florestal: Zonas Ripárias – Alfredo Wagner/SC.

Menegon, N. (2005) **“Aplicação do Modelo Matemático de Qualidade de Água – SIMOX III – na Bacia do Rio Camanducaia”**. Dissertação de Mestrado, USP.

Metcalf & Eddy (2003). **“Wastewater Engineering: treatment and reuse”**. Metcalf & Eddy Inc. 4 ed., 1819p.

Naghetini, M. Pinto, E. J. A. (2007). **Hidrologia Estatística**. CPRM. 1ª edição. 561p.

Pelletier, G. J., Chapra, S. C., TAO, H. (2006). **“QUAL2Kw – A Framework for Modeling Water Quality in Streams and Rivers using a Generic Algorithm for Calibration”**. Environmental Modelling & Software, 21, pp. 419-425.

Pelletier, G. J., Chapra, S. C. (2008). **QUAL2Kw: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality – Theory and Documentation (version 5.1)**. Washington State, Department of Ecology. 104 p.

Pinto, R. M. S. (2000). **“Dados Radiométricos (0,400 A 0,900 mm) na Avaliação de Efeitos da Poluição Atmosférica em Folhas de Espécies da Mata Atlântica em Cubatão”**. Dissertação de Mestrado em Sensoriamento Remoto, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE.

Porto, R. L. L. (Org.) (1991) **.Hidrologia Ambiental**. São Paulo: ABRH. v. 1. 414 p.

Reckhow, K. H., Clements, J. T., Dodd, R. C.. (1990). “**Statistical Evaluation of Mechanistic Water-Quality Models**”. Journal of Environmental Engineering, Vol. 116, pp. 250-268.

Salvai, A., Bezdan, A. (2008). “**Water Quality Model QUAL2K in TMDL Development**”. BALWOIS - Water Observation and Information System for Balkan Countries Conference. 27, pp. 1-8.

Silva, R. A. P. (2006). “**Sistemas de Suporte à Tomada de Decisões em Gerenciamento de Cheias**”. Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção de grau de Mestre em Engenharia.

Streeter, H. W., Phelps, E.B. (1958). “**A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River III, Factors Concerned in the Phenomena of Oxidation and Reaeration**”, U.S. Pub. Health Serv., Pub. Health Bulletin N.º 146, February 1925, 75 pp. Reprinted by U.S., DHEW, PHA.

Tao, H. (2008). “**Calibration, Sensitivity and Uncertainty Analysis in Surface Water Quality Modeling**”. A dissertation submitted by Hua Tao in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy in Environmental and Water Resources Engineering at Tufts University.

Tchobanoglous, G., Schroeder, E.D. (1985). **Water Quality – Characteristics, Modeling, Modification**. Addison-Wesley, Reading, MA

Thomann, R.V. (1982). “**Verification of Water Quality Models**”. Journal of Environmental Engineering Division, ASCE, 108 (EE5), pp, 923-940

Thomann, R.V., Mueller, J. A. (1987). **Principles of Surface Water Quality Modeling and Control**. Harper International Edition. 644p.

Thomann, R. V. (1998). **“The future ‘Golden Age’ of predictive models for surface water quality and ecosystem management.”** Journal of Environmental Engineering, 124, 94–103.

Tucci, C.E.M. (org.). (1993). **Hidrologia - Ciência e Aplicação.** Coleção ABRH de Recursos Hídricos, v.4 – Porto Alegre: Ed. da Universidade: ABRH: EDUSP. 3ª edição 943 p.

Tucci, C.E.M. (org.). (1995). **Drenagem Urbana.** Coleção ABRH de Recursos Hídricos, v.5 – Porto Alegre: Ed. da Universidade/UFGRS. 1ª edição 428 p.

Turner, D. F., Pelletier, G. J., Kasper, B. (2009). **“Dissolved Oxygen and pH Modeling of a Periphyton Dominated, Nutrient Enriched River”.** Journal of Environmental Engineering, ASCE, 135, pp 645 – 652.

von Sperling, M. (1995) – **Introdução à Qualidade das Águas e ao Tratamento de Esgotos.** Vol. 1. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais. 3ª edição 451 p.

von Sperling, M. (2007) – **Estudos e Modelagem da Qualidade da Água.** Vol. 7. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais, 1ª edição 588p.

9. ANEXO A – TRANSCRIÇÃO DO MANUAL DO QUAL2Kw

9.1. Tempo de trânsito

O tempo de trânsito (ou tempo de residência) de cada elemento é calculado como

$$\tau_k = \frac{V_k}{Q_k} \quad \text{Equação (A-1)}$$

onde τ_k = é o tempo de residência do k^{th} elemento [d], V_k = o volume do k^{th} elemento [m^3] = $A_{c,k}\Delta X_k$, e ΔX_k = o comprimento do k^{th} elemento [m]. Tais tempos são então acumulados para determinar o tempo de trânsito do limite de montante ao limite de jusante do elemento i ,

$$t_{t,i} = \sum_{k=1}^i \tau_k \quad \text{Equação (A-2)}$$

Onde $t_{t,i}$ = tempo de trânsito [d].

9.2. Dispersão longitudinal

Há duas opções que podem ser utilizadas para determinar a dispersão longitudinal entre os limites de dois elementos: primeiramente o usuário pode inserir valores estimados na aba "REACH" ou, caso não se tenha os valores, a fórmula da equação A-3 é empregada internamente a partir das características hidráulicas do canal para computar a dispersão (Fischer *et al*, 1979 apud Pelletier *et al*, 2008):

$$E_{p,i} = 0.011 \frac{U_i^2 B_i^2}{H_i U_i^*} \quad \text{Equação (A-3)}$$

onde $E_{p,i}$ = dispersão longitudinal entre os elementos i e $i + 1$ [m^2/s], U_i = velocidade [m/s], B_i = largura [m], H_i = profundidade média [m], e U_i^* = velocidade de cisalhamento [m/s], que possui relação com os seguintes parâmetros:

$$U_i^* = \sqrt{g H_i S_i} \quad \text{Equação (A-4)}$$

onde g = aceleração da gravidade [= 9,81 m/s^2] e S = declividade do canal [adimensional].

Após computar ou inserir o $E_{p,i}$, a dispersão numérica é calculada da seguinte maneira:

$$E_{n,i} = \frac{U_i \Delta X_i}{2} \quad \text{Equação (A-5)}$$

A dispersão do modelo E_i (isto é, o valor usado nos cálculos do modelo) é então calculada da forma:

- Se $E_{n,i} < E_{p,i}$, a dispersão do modelo E_i é calculada como $E_{p,i} - E_{n,i}$;
- Se $E_{n,i} > E_{p,i}$, o modelo considera um valor nulo para a dispersão.

9.3. Modelo de temperatura

Conforme a Figura A1, o balanço de calor leva em consideração as transferências de calor entre os elementos adjacentes, cargas, abstrações, atmosfera e os sedimentos. O balanço de calor para o elemento i pode ser escrito como:

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} T_{i-1} - \frac{Q_i}{V_i} T_i - \frac{Q_{ab,i}}{V_i} T_i + \frac{E'_{i-1}}{V_i} (T_{i-1} - T_i) + \frac{E'_i}{V_i} (T_{i+1} - T_i) \\ + \frac{W_{h,i}}{\rho_w C_{pw} V_i} \left(\frac{\text{m}^3}{10^6 \text{cm}^3} \right) + \frac{J_{h,i}}{\rho_w C_{pw} H_i} \left(\frac{\text{m}}{100 \text{cm}} \right) + \frac{J_{s,i}}{\rho_w C_{pw} H_i} \left(\frac{\text{m}}{100 \text{cm}} \right) \quad \text{Equação (A-6)}$$

onde T_i = temperatura no elemento i [$^{\circ}\text{C}$], t = tempo [d], E_i = coeficiente de dispersão entre os elementos i e $i+1$ [m^3/d], $W_{h,i}$ = fontes de calor pontuais e não pontuais no elemento i [cal/d], ρ_w = densidade da água [g/cm^3], C_{pw} = calor específico da água [$\text{cal}/(\text{g}^{\circ}\text{C})$], $J_{h,i}$ = fluxo de calor ar-água [$\text{cal}/(\text{cm}^2 \text{ d})$], e $J_{s,i}$ = fluxo de calor sedimento-água [$\text{cal}/(\text{cm}^2 \text{ d})$].

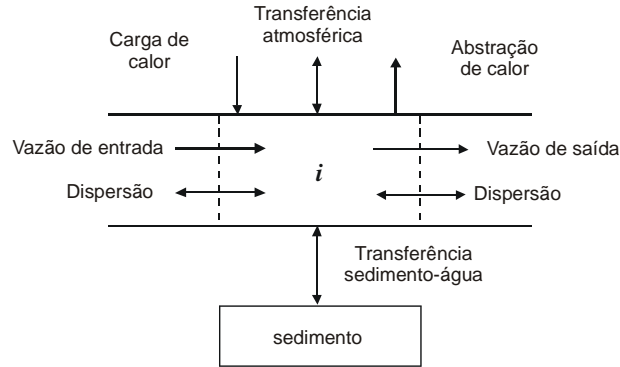


Figura A1 – Balanço de calor (adaptado de Pelletier et al, 2008).

O coeficiente de dispersão entre os elementos é computado como

$$E'_i = \frac{E_i A_{c,i}}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})/2} \quad \text{Equação (A-7)}$$

Nota-se que existem dois tipos de condições de contorno que são usados à jusante do rio: (1) condição de dispersão zero (condição de contorno natural) e (2) condição de contorno prescrita. A escolha dessas opções é realizada na aba "HEADWATER".

O saldo de calor das fontes é computado como:

$$W_{h,i} = \rho C_p \left[\sum_{j=1}^{psi} Q_{ps,i,j} T_{psi,j} + \sum_{j=1}^{npsi} Q_{nps,i,j} T_{npsi,j} \right] \quad \text{Equação (A-8)}$$

onde $T_{ps,i,j}$ é a j th fonte pontual de temperatura para o elemento i [$^{\circ}\text{C}$], e $T_{nps,i,j}$ é a j th carga difusa de temperatura para o elemento i [$^{\circ}\text{C}$].

A. Fluxo de calor na superfície

Conforme ilustrado na Figura A2, a troca de calor com a superfície é modelada conforme a combinação de cinco processos:

$$J_h = I(0) + J_{an} - J_{br} - J_c - J_e \quad \text{Equação (A-9)}$$

onde $I(0)$ = radiação solar de onda curta na superfície da água, J_{an} = radiação atmosférica de onda longa, J_{br} = reflexão de onda longa pela água, J_c = condução e J_e = evaporação. Todos os fluxos são expressos em $\text{cal}/\text{cm}^2/\text{d}$.

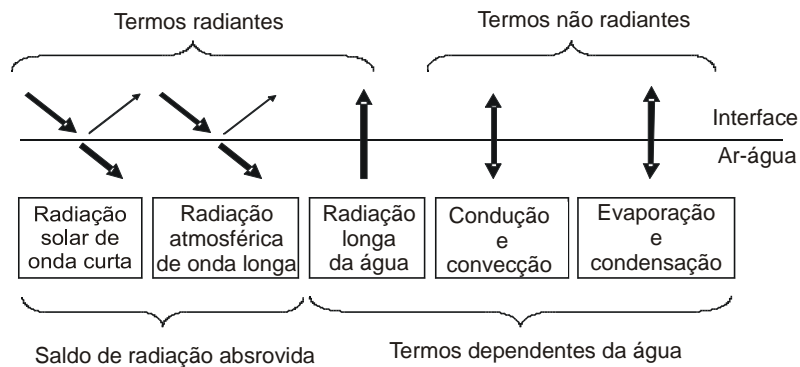


Figura A2 – Os componentes da troca de calor pela superfície (adaptado de Pelletier *et al*, 2008).

B. Radiação solar

O modelo computa a quantidade de radiação solar na água em uma latitude (L_{at}) e longitude (L_m) da superfície do planeta. Essa quantidade é uma função da radiação do topo da atmosfera terrestre que é atenuada pela transmissão atmosférica, cobertura de nuvens reflexão e sombreamento:

$$I(0) = I_0 a_t a_c (1 - R_s) (1 - S_f)$$

Equação (A-10)

radição extraterrestre atenuação atmosférica atenuação pelas nuvens reflexão sombreamento

onde $I(0)$ = radiação solar na superfície da água [$\text{cal}/\text{cm}^2/\text{d}$], I_0 = radiação extraterrestre, isto é, no topo da atmosfera terrestre [$\text{cal}/\text{cm}^2/\text{d}$], a_t = atenuação atmosférica, a_c = atenuação por nuvens, R_s = albedo (fração refletida), and S_f = sombreamento (fração bloqueada por vegetação, topografia).

RADIAÇÃO EXTRATERRESTRE: A radiação extraterrestre é calculada de acordo com

$$I_0 = \frac{W_0}{r^2} \sin \alpha$$

Equação (A-11)

onde W_0 = constante solar [$1367 \text{ W}/\text{m}^2$ ou $2823 \text{ cal}/\text{cm}^2/\text{d}$], r = raio normalizado da órbita da Terra (isto é, a relação entre a distância real entre o Sol e a Terra e a distância média entre o Sol e a Terra), e α = altitude do Sol [radianos], que pode ser computada como

$$\sin \alpha = \sin \delta \sin L_{at} + \cos \delta \cos L_{at} \cos(\tau)$$

Equação (A-12)

onde δ = declinação solar [radianos], L_{at} = latitude local [radianos], e τ = o ângulo local do Sol [radianos].

O raio normalizado pode ser estimado por

$$r = 1 + 0,017 \cos\left(\frac{2\pi}{365}(186 - Dy)\right)$$

Equação (A-13)

onde Dy = dia Juliano (Jan. 1 = 1, Jan. 2 = 2, etc.).

A declinação solar pode ser estimada como

$$\delta = 23,45 \frac{\pi}{180} \cos\left(\frac{2\pi}{365}(172 - Dy)\right)$$

Equação (A-14)

O ângulo local horário em radianos é dado por

$$\tau = \left(\frac{trueSolarTime}{4} - 180 \right) \frac{\pi}{180} \quad \text{Equação (A-15)}$$

onde:

$$trueSolarTime = localTime - eqtime - 4 \times L_{lm} - 60 \times timezon \quad \text{Equação (A-16)}$$

onde *trueSolarTime* é o tempo solar determinado da posição real do sol no céu [minutos], *localTime* é a hora local em minutos (hora local padrão), *L_{lm}* é a longitude local (décimos de graus positivos para o hemisfério ocidental), e *timezone* é zona de hora local em horas relativa ao Meridiano de Greenwich. O valor de *eqtime* representa a diferença entre a hora solar verdadeira e a hora solar média em minutos de tempo.

O QUAL2Kw calcula a altitude do Sol e o *eqtime*, assim como as horas de nascer do Sol e pôr do Sol através de algoritmos desenvolvidos pela NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration).

O fotoperíodo *f* [horas] é computado como

$$f = t_{ss} - t_{sr} \quad \text{Equação (A-17)}$$

onde *t_{ss}* = hora do pôr do sol [horas] e *t_{sr}* = hora do nascer do sol [horas].

ATENUAÇÃO ATMOSFÉRICA: o QUAL2Kw utiliza dois métodos para estimar a fração da atenuação atmosférica de um céu limpo (*a₁*):

- Bras (1990)
- Ryan e Stolzenbach (1972)

O método de Bras computa *a₁* como:

$$a_1 = e^{-n_{fac} a_1 m} \quad \text{Equação (A-18)}$$

onde *n_{fac}* é um fator de turbidez atmosférica que varia de aproximadamente 2 para céus limpos até 4 ou 5 para céus neblinosos de áreas urbanas. O coeficiente de espalhamento molecular (*a₁*) é calculado como

$$a_1 = 0,128 - 0,054 \log_{10} m \quad \text{Equação (A-19)}$$

onde *m* é a massa de ar óptica, calculada por

$$m = \frac{1}{\sin \alpha + 0,15(\alpha_d + 3,885)^{-1,253}} \quad \text{Equação (A-20)}$$

onde *α_d* é a altitude do sol em graus a partir do horizonte = *α* × (180°/π).

O modelo de Ryan e Stolzenbach (1972) computa *a₁* a partir de uma elevação da superfície e a altitude solar como:

$$a_1 = a_{tc} m \left(\frac{288 - 0,0065 elev}{288} \right)^{5,256} \quad \text{Equação (A-21)}$$

onde *a_{tc}* é o coeficiente de transmissão atmosférica (0,70 - 0,91, valor típico aproximadamente 0,8), e *elev* é a elevação da superfície do solo em metros.

ATENUAÇÃO DE NUVENS: a atenuação da radiação solar devido à cobertura de nuvens é calculada como

$$a_c = 1 - 0,65 C_L^2 \quad \text{Equação (A-22)}$$

onde *C_L* = fração do céu coberto por nuvens.

REFLECTIVIDADE: é calculada como

$$R_s = A\alpha_d^B$$

Equação (A-23)

onde A e B são coeficientes relacionados à cobertura de nuvens (Tabela A1).

Tabela A1 – Coeficientes usados para calcular a refletividade baseados na cobertura de nuvens.

Nebulosidade	Limpo		Espalhada		Interrompida		Nublado	
C_L	0		0,1-0,5		0,5-0,9		1,0	
Coeficientes	A	B	A	B	A	B	A	B
	1,18	-0,77	2,20	-0,97	0,95	-0,75	0,35	-0,45

SOMBREAMENTO: é uma variável de entrada no QUAL2Kw (aba "SHADE"), sendo definida pela fração da radiação solar potencial que é bloqueada pela topografia e vegetação.

C. Radiação atmosférica de ondas longas

O fluxo descendente da radiação de ondas longas da atmosfera é um dos maiores termos no balanço de calor na superfície. Esse fluxo pode ser calculado pela Lei de Stefan-Boltzmann:

$$J_{an} = \sigma(T_{air} + 273)^4 \varepsilon_{sky} (1 - R_L) SKOP_i$$

Equação (A-24)

onde σ = constante de Stefan Boltzmann = $11,7 \times 10^{-8}$ cal/(cm² d K⁴), T_{air} = temperatura do ar [°C], ε_{sky} = emissividade efetiva da atmosfera [adimensional], e R_L = coeficiente de reflexão de ondas longas [adimensional]. A emissividade é a relação entre a variação de ondas longas de um objeto comparado com a radiação de um emissor perfeito na mesma temperatura. O coeficiente de reflexão é geralmente pequeno e assume-se tipicamente com valores iguais a 0,03. O termo $SKOP_i$ é o fator de abertura da fração solar (Rutherford *et al*, 1997 apud Pelletier *et al*, 2008).

O modelo de radiação de ondas longas é selecionado na aba "LIGHT AND HEAT" do QUAL2Kw. Três métodos alternativos [Brutsaert (1982), Brunt (1932) e Koberg (1964)] estão disponíveis para representar a emissividade efetiva (ε_{sky}):

Brutsaert (1982). A equação de Brutsaert é fisicamente embasada ao invés de ser empiricamente derivada e vem apresentando resultados satisfatórios para uma ampla faixa de condições atmosféricas de temperatura do ar e umidade em latitudes intermediárias para condições acima do congelamento:

$$\varepsilon_{clear} = k_{brut} \left(\frac{1,333224 e_{air}}{T_a} \right)^{1/7}$$

Equação (A-25)

onde e_{air} é a pressão de vapor de ar [mm Hg], e T_a é a temperatura do ar em °K. o fator de 1,333224 converte a pressão de vapor de mm Hg para millibars. Brutsaert (1982) recomendou um valor default de 1,24 para k_{brut} baseado em valores típicos para várias constantes físicas. Muitos artigos vêm sendo publicados com vários valores recomendados para k_{brut} considerando a incerteza e a calibração devido a observações de radiação de ondas longas. Crawford e Duchon (1999) apud Pelletier *et al* (2008) sugeriram um range para k_{brut} de 1,28 em Janeiro até 1,16 em Julho com variações senoidais. Sridhar e Elliot (2002) apud Pelletier *et al* (2008) recomendaram um valor médio de k_{brut} de 1,31 baseados em calibração na observação de radiação de ondas longas em Oklahoma, com valores variando de 1,30 a 1,32 em quatro locais. Culf e Gash (1993) apud Pelletier *et al* (2008) também recomendaram um valor de 1,32 ao invés de 1,24 durante estações secas na Nigéria, e um valor reduzido nas estações úmidas. O QUAL2Kw permite o usuário especificar o valor de entrada de k_{brut} e sugere um valor default de 1,24.

A pressão de vapor do ar [mm Hg] é computada como

$$e_{air} = 4,596 e^{\frac{17,27T_d}{237,3+T_d}}$$

Equação (A-26)

onde T_d = a temperatura do ponto de orvalho [°C].

Brunt (1932). A equação de Brunt é um modelo empírico que vem sendo comumente utilizado em modelos de qualidade de água (Thomann, 1987):

$$\varepsilon_{clear} = A_a + A_b \sqrt{e_{air}} \quad \text{Equação (A-27)}$$

onde A_a e A_b são coeficientes empíricos. Valores de A_a vêm sendo reportados em uma faixa de 0,5 a 0,7 e valores de A_b em uma faixa de 0,031 a 0,076 mm Hg^{-0.5} para uma ampla faixa de condições atmosféricas. O QUAL2Kw utiliza um valor médio de $A_a = 0,6$ com $A_b = 0,031$ mmHg^{-0.5} se o método de Brunt é selecionado na aba "LIGHT AND HEAT".

A seleção do modelo de ondas longas para uma aplicação particular deve idealmente ser guiada por comparação entre dados observados e modelados em um determinado local. Entretanto, sabe-se que medições diretas são raramente realizadas. O método de Brutsaert é recomendado para representar uma ampla faixa de condições atmosféricas (Pelletier *et al*, 2008).

D. Radiação de ondas longas da água

A radiação que retorna da superfície da água é representada pela Lei de Stefan-Boltzmann:

$$J_{br} = \varepsilon \sigma (T + 273)^4 SKOP_i \quad \text{Equação (A-28)}$$

onde ε = emissividade da água (= 0,97) e T = temperatura da água [°C]. O termo $SKOP_i$ é a fração de abertura do céu.

E. Condução e Convecção

A condução é a transferência de calor de uma molécula para outra molécula quando corpos de diferentes temperaturas estão em contato. A convecção é a transferência de calor que ocorre devido ao movimento das massas dos fluidos (Pelletier *et al*, 2008). Ambos podem ocorrer na interface ar-água e podem ser descritos por:

$$J_c = c_1 f(U_w) (T_s - T_{air}) \quad \text{Equação (A-29)}$$

onde c_1 = coeficiente de Bowen (= 0,47 mmHg/°C). O termo $f(U_w)$ define a dependência da transferência da velocidade do vento sobre a superfície da água onde U_w é a velocidade do vento medida em uma distância fixa acima da superfície da água.

Muitas relações existem para definir a dependência do vento. Bras (1990), Edinger *et al* (1974), e Shanahan (1984) apud Pelletier (2008), e alguns pesquisadores propuseram que a condução / convecção e a evaporação são negligenciáveis na ausência de vento, o que é consistente com a assunção que somente processos moleculares contribuem para a transferência de massa e calor sem vento. Outros mostraram que tais fenômenos podem ocorrer na ausência do vento. Esta última opinião foi defendida por Edinger *et al* (1974), especialmente para corpos d'água que possuem temperaturas maiores que a do ar.

Brady, Graves e Geyer (1969) apud Pelletier *et al* (2008) apontaram que se a temperatura da superfície da água é maior que a temperatura do ar, então o ar adjacente à superfície da água tenderia a se tornar mais úmido e mais quente que a camada superior, tornando-se assim menos denso. Tal fenômeno resulta em um movimento vertical de correntes de ar, onde é possível que ocorram maiores taxas de transferência de massa e calor da superfície da água (mesmo sem vento) que seria possível pela difusão molecular isoladamente. Ademais, as temperaturas das águas em rios naturais são frequentemente maiores que a temperatura do ar, especialmente à noite.

Três opções estão disponíveis na aba "LIGHT AND HEAT" do QUAL2Kw para calcular $f(U_w)$:

Brady, Graves, and Geyer (1969)

$$f(U_w) = 19,0 + 0,95U_w^2 \quad \text{Equação (A-30)}$$

onde U_w = velocidade do vento em uma altura de 7 m [m/s].

Adams *et al.* (1987)

Adams 1: essa formulação usa uma função empírica para estimar o efeito das correntes de convecção causadas por diferenças de temperaturas virtuais entre a água e o ar, e a equação de Harbeck (1962) é usada para representar a contribuição à condução / convecção e evaporação que não são devidas às correntes de convecção causadas por altas temperaturas virtuais da água:

$$f(U_w) = 0,271 \sqrt{(22,4 \Delta \theta_v^{1/3})^2 + (24,2 A_{acresl}^{-0,05} U_{w, mph})^2} \quad \text{Equação (A-31)}$$

onde $U_{w,mph}$ é a velocidade do vento [milhas/hora] e $A_{acres,i}$ é a área da superfície do trecho i em acres. A constante 0,271 converte as unidades de BTU $\text{pé}^{-2} \text{dia}^{-1} \text{mmHg}^{-1}$ para $\text{cal cm}^{-2} \text{dia}^{-1} \text{mmHg}^{-1}$.

Adams 2: a formulação usa uma função empírica das diferenças da temperatura virtual com a equação de Marciano e Harbeck (1952) para a contribuição à convecção / condução e evaporação que não é devida à temperatura virtual da água:

$$f(U_w) = 0,271 \sqrt{(22,4 \Delta \theta_v^{1/3})^2 + (17 U_{w,mph})^2} \quad \text{Equação (A-32)}$$

A temperatura virtual é definida como a temperatura do ar seco que tem a mesma densidade em relação ao ar abaixo das condições de umidade *in situ*. A diferença da temperatura virtual entre a água e o ar ($\Delta \theta_v$ em °F) explica a flutuabilidade do ar úmido acima da superfície da água aquecida. A diferença da temperatura virtual é estimada da temperatura da água ($T_{w,f}$ em °F), temperatura do ar ($T_{air,f}$ em °F), pressão de vapor da água e do ar (e_s e e_{air} em mmHg), e da pressão atmosférica (p_{atm} é estimada como pressão atmosférica padrão de 760 mmHg no QUAL2Kw):

$$\Delta \theta_v = \left(\frac{T_{w,f} + 460}{1 + 0,378 e_s / p_{atm}} - 460 \right) - \left(\frac{T_{air,f} + 460}{1 + 0,378 e_{air} / p_{atm}} - 460 \right) \quad \text{Equação (A-33)}$$

A altura da medição da velocidade do vento é também importante para a estimativa da condução / convecção e evaporação. O QUAL2Kw ajusta internamente a velocidade do vento para a altura correta para a função de vento que é selecionada na aba "LIGHT AND HEAT". Os valores de entrada para a velocidade do vento na aba "WIND SPEED" são assumidos como representação das condições a uma altura de 7m acima da superfície da água. Para converter as medições de velocidade de vento ($U_{w,z}$ em m/s) dadas em uma altura qualquer (z_w em m) para as condições equivalentes a uma altura de $z = 7\text{m}$ para entrada na aba "WIND SPEED", a lei exponencial da velocidade do vento deve ser utilizada:

$$U_w = U_{wz} \left(\frac{z}{z_w} \right)^{0,15} \quad \text{Equação (A-34)}$$

F. Evaporação e Condensação

A perda de calor devido à evaporação pode ser representada pela Lei de Dalton:

$$J_e = f(U_w)(e_s - e_{air}) \quad \text{Equação (A-35)}$$

onde e_s = a saturação da pressão de vapor na superfície da água [mmHg], e e_{air} = pressão de vapor do ar [mmHg]. A saturação da pressão de vapor é calculada por

$$e_{air} = 4,596 e^{\frac{17,27T}{237,3+T}} \quad \text{Equação (A-36)}$$

G. Transferência de calor sedimento-água

Um balanço de calor do sedimento do fundo de um elemento i pode ser escrito como:

$$\frac{dT_{2,i}}{dt} = - \frac{J_{s,i} + J_{hyp,i}}{\rho_s C_{ps} H_{2,i}} \quad \text{Equação (A-37)}$$

onde $T_{2,i}$ = é a temperatura do sedimento de fundo do elemento i [°C], $J_{s,i}$ = fluxo de calor sedimento-água [$\text{cal}/(\text{cm}^2 \text{d})$], $J_{hyp,i}$ = fluxo de calor entre a água e o sedimento devido às mudanças da vazão da zona hiporreica, ρ_s = densidade dos sedimentos [g/cm^3], C_{ps} = calor específico dos sedimentos [$\text{cal}/(\text{g} \text{°C})$], e $H_{2,i}$ = e espessura efetiva da camada de sedimentos [cm]. A quantidade $\rho_s C_{ps}$ pode ser estimada por K_s / \square_s , onde K_s é a condutividade

termal [$\text{cal}/(\text{s cm °C})$] e \square_s é difusidade termal [cm^2/s]. Os valores de $H_{2,i}$, K_s , e \square_s são necessários como entrada na aba "REACH" do QUAL2Kw.

O fluxo de condução do calor dos sedimentos para a água pode ser computado como:

$$J_{s,i} = \frac{86400 K_s}{H_{2,i} / 2} (T_{2,i} - T_{1,i}) \quad \text{Equação (A-38)}$$

onde a condutividade termal $K_s = \alpha_s \rho_s C_{ps}$ e a constante 86400 converte unidades de cal/cm²/s para cal/cm²/d.

As propriedades termais de alguns sedimentos naturais junto com seus componentes são apresentados na Tabela A2.

Tabela A2 – Propriedades térmicas dos sedimentos naturais e dos materiais que compõem os sedimentos naturais (adaptado de Pelletier et al, 2008).

Tipo do material	condutividade termal		difusidade termal		r g/cm ³	C_p cal/(g °C)	rCp cal/(cm ³ °C)	Referênci
	w/m ^{°C}	cal/s/cm ^{°C}	m ² /s	cm ² /s				
<i>Amostras de sedimentos</i>								
Lama lisa	1,82	0,0044	4,80E-07	0,0048			0,906	(1)
Areia	2,50	0,0060	7,90E-07	0,0079			0,757	"
Lama arenosa	1,80	0,0043	5,10E-07	0,0051			0,844	"
Lama	1,70	0,0041	4,50E-07	0,0045			0,903	"
Areia úmida	1,67	0,0040	7,00E-07	0,0070			0,570	(2)
Areia com 23% de saturação	1,82	0,0044	1,26E-06	0,0126			0,345	(3)
Turfa úmida	0,36	0,0009	1,20E-07	0,0012			0,717	(2)
Pedra	1,76	0,0042	1,18E-06	0,0118			0,357	(4)
Argila com 75% de saturação	1,78	0,0043	6,00E-07	0,0060			0,709	(3)
Lago, sedimento gelatinoso	0,46	0,0011	2,00E-07	0,0020			0,550	(5)
Canal de concreto	1,55	0,0037	8,00E-07	0,0080	2,200	0,210	0,460	"
<i>Média das amostras de sedimento:</i>	<i>1,57</i>	<i>0,0037</i>	<i>6,45E-07</i>	<i>0,0064</i>			<i>0,647</i>	
<i>Medições mescladas</i>								
Lago, margem da costa	0,59	0,0014						(5)
Lago, sedimentos macios			3,25E-07	0,0033				"
Lago, com areia			4,00E-07	0,0040				"
Rio, fundo de areia			7,70E-07	0,0077				"
<i>Materiais componentes:</i>								
Água	0,59	0,0014	1,40E-07	0,0014	1,000	0,999	1,000	(6)
Argila	1,30	0,0031	9,80E-07	0,0098	1,490	0,210	0,310	"
Terra, seca	1,09	0,0026	3,70E-07	0,0037	1,500	0,465	0,700	"
Areia	0,59	0,0014	4,70E-07	0,0047	1,520	0,190	0,290	"
Terra, úmida	1,80	0,0043	4,50E-07	0,0045	1,810	0,525	0,950	"
Granito	2,89	0,0069	1,27E-06	0,0127	2,700	0,202	0,540	"
<i>Média dos materiais compostos</i>	<i>1,37</i>	<i>0,0033</i>	<i>6,13E-07</i>	<i>0,0061</i>	<i>1,670</i>	<i>0,432</i>	<i>0,632</i>	

(1) Andrews e Rodvey (1980)

(2) Geiger (1965)

(3) Nakshabandi e Kohnke (1965)

(4) Chow (1964) e Carslaw and Jaeger (1959)

(5) Hutchinson 1957, Jobson 1977, e Likens and Johnson 1969

(6) Cengel, Griggull, Mills, Bejan, Kreith e Bohn

Os componentes da Tabela A2 sugerem que a presença de materiais sólidos em rios com sedimentos produz maiores coeficientes de difusividade termal que em relação à água ou sedimentos porosos de lagos. No QUAL2Kw é sugerido um valor default de 0,0064 cm²/s para esse parâmetro.

Ademais, o calor específico tende a diminuir com a densidade. Assim, o produto dessas duas quantidades tende a ser mais constante que os seus multiplicandos. Entretanto, aparentemente a presença de material sólido em rios com sedimentos produzem um menor produto em relação à água ou sedimentos gelatinosos de lagos. No QUAL2Kw é sugerido um valor default de 1,6 W/(m²°C) para a condutividade termal.

Uma espessura de 10cm é recomendada na ausência de trocas significativas na zona hiporreica no sentido de capturar o efeito dos sedimentos no balanço diário de calor para a água. Se as trocas de vazão na zona hiporreica são significativas, então a espessura efetiva dessa zona varia de 20 a 300% da profundidade do rio (Harvey e Wagner, 2000; Gooseff et al., 2003 apud Pelletier et al, 2008), com valores relativos mais altos em rios menores. O tempo de residência de materiais nessa zona é tipicamente da ordem de 0,01 a 10 dias (Poole e Berman, 2001 apud Pelletier et al, 2008).

A zona hiporreica é a camada de sedimento saturado que é adjacente ao rio e abaixo dele. A zona hiporreica é hidraulicamente conectada ao rio, sendo que a vazão do rio continuamente entra e sai dessa zona (Pelletier et al, 2008).

Takahashi & Ohta (1999) apud Masato (2003) definiram a zona hiporreica como uma zona onde água fluvial entra por baixo do leito do canal e a condição hidráulica da água fica entre aquelas das águas fluvial e subterrânea (Figura A3). Neste sentido, a zona hiporreica também é considerada um ecótono onde a água subterrânea flui entre os ecossistemas terrestre e aquático. Segundo os mesmos autores, a profundidade é normalmente 20 a 60 cm, sendo difícil determinar este valor na prática.

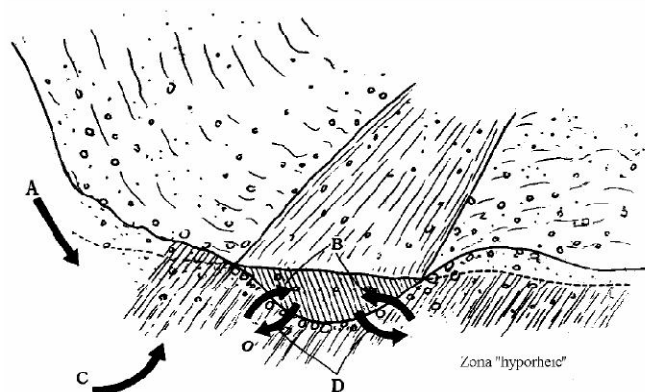


Figura A3 - Conceito da zona hiporreica (Takahashi & Ohta ,1999, apud Masato, 2003). Observação: A origem da água no rio é da água subsuperficial de vertente (A), água subsuperficial da zona hiporreica (B), e água subterrânea bem profunda (C). Normalmente a água hiporreica recarrega o rio, mas às vezes o rio recarrega a zona hiporreica (D).

O fluxo de calor da troca hiporreica da água entre o rio e a zona do sedimento hiporreica é calculado como:

$$J_{hyp,i} = \frac{E'_{hyp,i} \rho C_p}{A_{sf,i}} (T_{2,i} - T_{1,i}) \left(\frac{100 \text{ cm}}{\text{m}} \right) \quad \text{Equação (A39)}$$

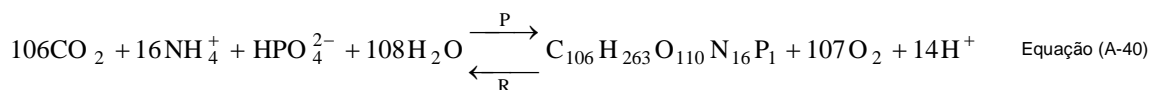
onde $E'_{hyp,i}$ é a vazão de troca hiporreica no elemento i [m^3/dia], e $A_{sf,i}$ é a área da superfície da zona hiporreica no elemento i (m^2). A vazão de troca hiporreica é uma variável de entrada na aba "REACH" do QUAL2Kw, e a área da superfície é calculada pelo comprimento do trecho e pela largura do canal que também são dados de entrada nessa mesma aba.

9.4. Reações fundamentais

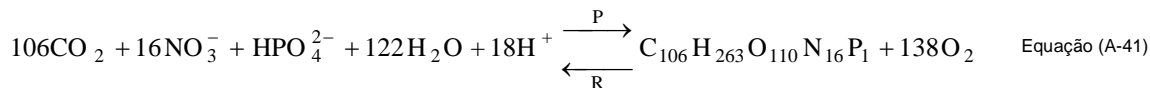
A. Reações Bioquímicas

Fotossíntese e Respiração das plantas:

Amônia como substrato:



Nitrato como substrato:



Nitrificação:



Desnitrificação:



Nas seções posteriores reações adicionais envolvendo o pH e a amônia serão apresentadas.

B. Estequiometria da Matéria Orgânica

O modelo requer a estequiometria da matéria orgânica (fitoplâncton e detritos) a serem especificadas pelo usuário. É sugerida a seguinte aproximação

$$100 \text{ gD} : 40 \text{ gC} : 7200 \text{ mgN} : 1000 \text{ mgP} : 1000 \text{ mgA} \quad \text{Equação (A-44)}$$

onde gX = massa do elemento X [g] e mgY = massa do elemento Y [mg]. Os termos D, C, N, P e A referem-se, respectivamente, ao peso seco, carbono, nitrogênio, fósforo e clorofila a. A faixa da clorofila a é a maior desses elementos, variando de 500 a 2000 mgA (Chapra, 1997 apud Pelletier, 2008).

C. Geração de Oxigênio e Consumo

O modelo requer que as taxas de geração e consumo de oxigênio sejam prescritas. Se a amônia é o substrato, a seguinte relação (baseada na Equação A-40) pode ser usada para determinar as gramas de oxigênio geradas para cada grama de matéria vegetal produzido pela fotossíntese:

$$r_{oca} = \frac{107 \text{ moleO}_2 (32 \text{ gO}_2/\text{moleO}_2)}{106 \text{ moleC}(12 \text{ gC}/\text{moleC})} = 2,69 \frac{\text{gO}_2}{\text{gC}} \quad \text{Equação (A-45)}$$

Se o nitrato é o substrato, a seguinte relação (baseada na Equação A-41) é aplicada:

$$r_{ocn} = \frac{138 \text{ moleO}_2 (32 \text{ gO}_2/\text{moleO}_2)}{106 \text{ moleC}(12 \text{ gC}/\text{moleC})} = 3,47 \frac{\text{gO}_2}{\text{gC}} \quad \text{Equação (A-46)}$$

Para a nitrificação, a seguinte relação é utilizada baseada na Equação (A-42):

$$r_{on} = \frac{2 \text{ moleO}_2 (32 \text{ gO}_2/\text{moleO}_2)}{1 \text{ moleN}(14 \text{ gN}/\text{moleN})} = 4,57 \frac{\text{gO}_2}{\text{gN}} \quad \text{Equação (A-47)}$$

Utilização da DBO carbonácea devido à Desnitrificação

Conforme representado pela Equação A-43, a DBO carbonácea é utilizada durante a desnitrificação pela expressão:

$$r_{ondn} = 2.67 \frac{\text{gO}_2}{\text{gC}} \frac{5 \text{ moleC} \times 12 \text{ gC}/\text{moleC}}{4 \text{ moleN} \times 14 \text{ gN}/\text{moleN}} \times \frac{1 \text{ gN}}{1000 \text{ mgN}} = 0.00286 \frac{\text{gO}_2}{\text{mgN}} \quad \text{Equação (A-48)}$$

D. Efeito da Temperatura nas Reações

O efeito da temperatura para todas as reações de primeira ordem usadas no modelo é representado por

$$k(T) = k(20)\theta^{T-20} \quad \text{Equação (A-49)}$$

onde $k(T)$ = taxa da reação [1/d] em uma dada temperatura T [°C] e θ = coeficiente de temperatura da reação.

E. Variáveis compostas

Além das variáveis de estado, o QUAL2Kw também apresenta algumas variáveis que são computadas como:

Carbono Orgânico Total (mgC/L):

$$TOC = \frac{c_s + c_f}{r_{oc}} + r_{ca} a_p + r_{cd} m_o \quad \text{Equação (A-50)}$$

Nitrogênio Total ($\mu\text{gN/L}$):

$$TN = n_o + n_a + n_n + r_{na} a_p$$

Equação (A-51)

Fósforo Total ($\mu\text{gP/L}$):

$$TP = p_o + p_i + r_{pa} a_p$$

Equação (A-52)

Nitrogênio Kjeldahl Total ($\mu\text{gN/L}$):

$$TKN = n_o + n_a + r_{na} a_p$$

Equação (A-53)

Sólidos Suspensos Totais (mgD/L):

$$TSS = r_{da} a_p + m_o + m_i$$

Equação (A-54)

DBO carbonácea de último estágio (mgO_2/L):

$$CBOD_u = c_s + c_f + r_{oc} r_{ca} a_p + r_{oc} r_{cd} m_o$$

Equação (A-55)

F. Relações entre as Variáveis do Modelo e os Dados

As seguintes variáveis são necessárias para geração de dados de saída do modelo:

TEM = temperatura ($^{\circ}\text{C}$);

TKN = nitrogênio Kjeldahl total ou TN = nitrogênio total ($\mu\text{gN/L}$);

NH_4 = amônio ($\mu\text{gN/L}$);

NO_2 = nitrito ($\mu\text{gN/L}$);

NO_3 = nitrato ($\mu\text{gN/L}$);

CHLA = clorofila a ($\mu\text{gA/L}$);

TP = fósforo total ($\mu\text{gP/L}$);

SRP = fósforo solúvel reativo ($\mu\text{gP/L}$);

TSS = sólidos suspensos totais (mgD/L);

VSS = sólidos suspensos voláteis (mgD/L);

TOC = carbono orgânico total (mgC/L);

DOC = carbono orgânico dissolvido (mgC/L);

DO = oxigênio dissolvido (mgO_2/L);

pH = pH;

ALK = alcalinidade (mgCaCO_3/L);

COND = condutância específica (μmhos).

As variáveis de estado do modelo podem ser relacionadas da seguinte forma:

s = COND

m_i = TSS-VSS ou TSS r_{dc} (TOC-DOC)

o = DO

$n_o = \text{TKN} - \text{NH}_4 - r_a \text{CHLA}$ ou $n_o = \text{TN} - \text{NO}_2 - \text{NO}_3 - \text{NH}_4 - r_{na} \text{CHLA}$

$n_a = \text{NH}_4$

$n_n = \text{NO}_2 + \text{NO}_3$

$p_o = \text{TP} - \text{SRP} - r_{pa} \text{CHLA}$

$p_i = \text{SRP}$

$a_p = \text{CHLA}$

$\text{pH} = \text{pH}$

$\text{Alk} = \text{ALK}$

G. DBO Carbonácea

O modelo baseia-se na DBO carbonácea filtrada de último estágio, ou seja, é necessário filtrar a amostra e inibir a nitrificação pela adição de 2-cloro-6-triclorometil piredina. Caso não seja possível realizar a inibição, o valor medido pode ser corrigido para o nitrogênio através da subtração dos equivalentes de oxigênio do nitrogênio reduzido ($= r_{on} \times \text{TKN}$). Entretanto esse ajuste pode produzir erros substanciais.

A filtração deve ser realizada uma vez que o QUAL2Kw distingue as diferenças entre a matéria orgânica particulada (m_o e a_p) e a dissolvida (c_s e c_f), e caso a amostra não seja filtrada a DBO refletirá na oxidação de ambos os tipos.

O tempo de incubação deve ser o maior possível para que o valor da DBO de último estágio seja coletado ou é possível o uso da medição da DBO convencional de 5 dias e extrapolá-la para a DBO última através da Equação:

$$\text{CBODFNU} = \frac{\text{CBODFN5}}{1 - e^{-k_1 5}} \quad \text{Equação (A-56)}$$

Onde a CBODFNU = DBO carbonácea de último estágio filtrada e inibida de nitrificação, [mgO_2/L], CBODFN₅ = DBO carbonácea dissolvida e inibida de nitrificação de 5 dias [mgO_2/L], e k_1 = a taxa de decomposição da DBO carbonácea na garrafa [1/d].

Assim, se todas essas condições forem satisfeitas:

$$c_f + c_s = \text{CBODFNU} \quad \text{Equação (A-57)}$$

Em relação à definição do uso da DBO rápida e lenta, o manual do modelo apresenta duas estratégias:

- Opção 1: representar todo o carbono orgânico oxidável dissolvido em DBO rápida;

$$c_f = \text{CBODFNU} \quad \text{Equação (A-58)}$$

$$c_s = 0 \quad \text{Equação (A-59)}$$

- Opção 2: usar a DBO carbonácea última para a última fração e computar a DBO lenta através da diferença com a medição de carbono orgânico dissolvido (DOC):

$$c_f = \text{CBODFNU} \quad \text{Equação (A-60)}$$

$$c_s = 0 \quad \text{Equação (A-61)}$$

A opção 2 funciona bem em sistemas onde diferentes tipos de DBO carbonácea estão presentes, principalmente efluentes industriais recalcitrantes como os da indústria de papel e celulose. Para sistemas predominantemente dominados por lançamentos de esgotos domésticos a opção 1 pode ser utilizada.

Para a estimativa da DBO carbonácea de último estágio a partir da DBO de 5 dias quando os dados disponíveis são escassos, é possível a utilização de uma simplificação da opção 1 onde se assume que a DBO₅ é aproximadamente equivalente à CBODFNU₅. Se a taxa de decaimento da DBO é assumida como valor típico de $0,23 \text{d}^{-1}$, então a DBO rápida carbonácea pode ser aproximada a $1,46 \times \text{DBO}_5$.

9.5. Reações constituintes sem a consideração da zona hiporreica

As relações matemáticas que descrevem as reações individuais e concentrações das variáveis de estado do modelo são:

A. Substância Conservativa (s)

Substâncias conservativas não sofrem reações:

$$S_s = 0$$

Equação (A-62)

B. Fitoplâncton (a_p)

O fitoplâncton aumenta devido à fotossíntese (B.1.) e é perdido via respiração (B.2.), morte (B.3.) e sedimentação (B.4.):

$$S_{ap} = \text{PhytoPhoto} - \text{PhytoResp} - \text{PhytoDeath} - \text{PhytoSettl} \quad \text{Equação (A-63)}$$

B.1. Fotossíntese

A fotossíntese do fitoplâncton é computada como

$$\text{PhytoPhoto} = \mu_p a_p \quad \text{Equação (A-64)}$$

onde μ_p = a taxa de fotossíntese do fitoplâncton [1/d] é uma função da temperatura, nutrientes e luz:

$$\mu_p = k_{gp}(T) \phi_{Np} \phi_{Lp} \quad \text{Equação (A-65)}$$

onde $k_{gp}(T)$ = é a taxa máxima de fotossíntese em uma temperatura T [1/d], ϕ_{Np} = fator de atenuação do nutriente do fitoplâncton [adimensional entre 0 e 1], e ϕ_{Lp} = coeficiente de atenuação da luz do fitoplâncton [adimensional entre 0 e 1].

LIMITAÇÃO POR NUTRIENTE: as equações de Michaelis-Menten são usadas para representar a limitação de crescimento algal em função do nitrogênio inorgânico, fósforo e carbono inorgânico. O valor mínimo é então usado para calcular o fator de atenuação do nutriente

$$\phi_{Np} = \min \left(\frac{n_a + n_n}{k_{sNp} + n_a + n_n}, \frac{p_i}{k_{sPp} + p_i}, \frac{[\text{H}_2\text{CO}_3^*] + [\text{HCO}_3^-]}{k_{sCp} + [\text{H}_2\text{CO}_3^*] + [\text{HCO}_3^-]} \right) \quad \text{Equação (A-66)}$$

onde k_{sNp} = constante de meia-saturação do nitrogênio, [µgN/L], k_{sPp} = constante de meia-saturação do fósforo [µgP/L], k_{sCp} = constante de meia-saturação do carbono inorgânico [mole/L], $[\text{H}_2\text{CO}_3^*]$ = concentração do dióxido de carbono dissolvido [mole/L], e $[\text{HCO}_3^-]$ = concentração do bicarbonato [mole/L].

LIMITAÇÃO PELA LUZ: é assumido que a atenuação pela luz segue a lei de Beer-Lambert:

$$\text{PAR}(z) = \text{PAR}(0) e^{-k_e z} \quad \text{Equação (A-67)}$$

onde $\text{PAR}(z)$ = radiação fotossintetizante disponível (PAR) em uma profundidade z abaixo da superfície da água [ly/d], e k_e = coeficiente de extinção da luz [m^{-1}]. A PAR na superfície da água é assumida como uma fração da radiação solar:

$$\text{PAR}(0) = 0,47 I(0)$$

O coeficiente de extinção é relacionado com as variáveis do modelo por:

$$k_e = k_{eb} + \alpha_i m_i + \alpha_o m_o + \alpha_p a_p + \alpha_{pn} a_p^{2/3} + \alpha_{mac} a_b / H_i \quad \text{Equação (A-68)}$$

onde k_{eb} = é o coeficiente secundário que contabiliza a extinção da luz pela água e cor [1/m], α_i , α_o , α_p , α_{pn} , e α_{mac} são constantes responsáveis em contabilizar os impactos dos sólidos suspensos inorgânicos [L/mgD/m], matéria orgânica particulada [L/mgD/m], e clorofila [L/µgA/m e (L/µgA)^{2/3}/m], e macrófitas [m³/gD/m], respectivamente. Valores sugeridos para tais coeficientes são listados na Tabela A3.

Símbolo	Valor	Referência
α_i	0,052	Di Toro (1978)
α_o	0,174	Di Toro (1978)
α_p	0,0088	Riley (1956)
α_{pn}	0,054	Riley (1956)
α_{mac}	0,01	Ikusima, 1970 (<i>Myriophyllum spicatum</i>)
α_{mac}	0,006	Titus e Adams, 1979 (<i>Myriophyllum spicatum</i>)
α_{mac}	0,013 to 0,019	Titus e Adams, 1979 (<i>Vallisneria americana</i>)
α_{mac}	0,024	Van der Bijl <i>et al.</i> , 1989 (<i>Potamogeton pectinatus</i>)

No QUAL2Kw existem 3 modelos para caracterizar o impacto da luz na fotossíntese do fitoplâncton, sendo eles apresentados na forma gráfica na Figura A4.

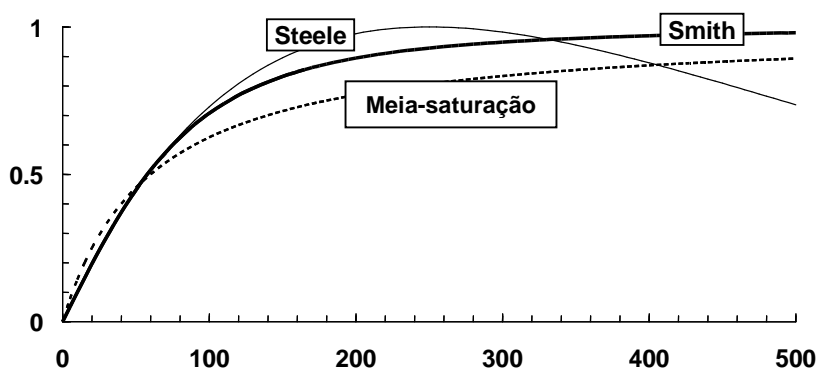


Figura A4 – Gráfico dos três modelos usados para a dependência da luz pelo fitoplâncton e algas de fundo. O gráfico mostra a atenuação do crescimento versus intensidade da PAR [ly/d] (adaptado de Pelletier *et al.*, 2008).

Modelo de meia saturação (Michaelis-Menten) da Luz (Baly 1935):

$$F_{Lp} = \frac{I(z)}{K_{Lp} + I(z)} \quad \text{Equação (A-69)}$$

onde F_{Lp} = atenuação do crescimento do fitoplâncton devido à luz e K_{Lp} = é o parâmetro de luz do fitoplâncton. No caso do modelo de meia saturação, o parâmetro de luz é um coeficiente de meia saturação [ly/d]. Essa função pode ser combinada com a lei de Beer-Lambert e integrada em relação à profundidade d'água, H [m], fornecendo o coeficiente de atenuação da luz:

$$\phi_{Lp} = \frac{1}{k_e H} \ln \left(\frac{K_{Lp} + I(0)}{K_{Lp} + I(0)e^{-k_e H}} \right) \quad \text{Equação (A-70)}$$

Função de Smith (Smith 1936):

$$F_{Lp} = \frac{I(z)}{\sqrt{K_{Lp}^2 + I(z)^2}} \quad \text{Equação (A-71)}$$

onde K_{Lp} = é o parâmetro de Smith para o fitoplâncton [ly/d]; isto é, a radiação fotossintetizante disponível (PAR) quando o crescimento é 70,7% do seu máximo. Essa função pode ser combinada com a lei de Beer-Lambert e integrada à profundidade fornecendo:

$$\phi_{Lp} = \frac{1}{k_e H} \ln \left(\frac{I(0)/K_{Lp} + \sqrt{1 + (I(0)/K_{Lp})^2}}{(I(0)/K_{Lp})e^{-k_e H} + \sqrt{1 + ((I(0)/K_{Lp})e^{-k_e H})^2}} \right) \quad \text{Equação (A-72)}$$

Equação de Steele (Steele 1962):

$$F_{Lp} = \frac{I(z)}{K_{Lp}} e^{1 - \frac{I(z)}{K_{Lp}}} \quad \text{Equação (A-73)}$$

onde K_{Lp} = é a radiação fotossintetizante disponível (PAR) onde o crescimento do fitoplâncton é ótimo [ly/d]. Essa função pode ser combinada com a lei de Beer-Lambert e integrada à profundidade fornecendo:

$$\phi_{Lp} = \frac{2.718282}{k_e H} \left(e^{-\frac{I(0)}{K_{Lp}} e^{-k_e H}} - e^{-\frac{I(0)}{K_{Lp}}} \right) \quad \text{Equação (A-74)}$$

B.2. RESPIRAÇÃO

A respiração do fitoplâncton é representada como uma reação de primeira ordem que é atenuada por baixas concentrações de oxigênio:

$$\text{PhytoResp} = F_{oxp} k_{rp}(T) a_p \quad \text{Equação (A-75)}$$

onde $k_{rp}(T)$ = taxa de respiração do fitoplâncton dependente da temperatura [1/d] e F_{oxp} = atenuação devido a concentrações baixas de oxigênio [adimensional]. A atenuação do oxigênio é modelada pelas Equações A-99 à A-101 com a dependência do oxigênio representado pelo parâmetro K_{sep} .

B.3. MORTE

A morte do fitoplâncton é representada como uma reação de primeira ordem:

$$\text{PhytoDeath} = k_{dp}(T) a_p \quad \text{Equação (A-76)}$$

onde $k_{dp}(T)$ = taxa de morte do fitoplâncton dependente da temperatura [1/d].

B.4. SEDIMENTAÇÃO

A sedimentação do fitoplâncton é representada como:

$$\text{PhytoSettl} = \frac{v_a}{H} a_p \quad \text{Equação (A-77)}$$

onde v_a = velocidade de sedimentação do fitoplâncton [m/d].

C. Algas de fundo (a_b)

As algas de fundo aumentam pela fotossíntese e sofrem decréscimo por respiração e morte:

$$S_b = \text{BotAlgPhot} - \text{BotAlgResp} - \text{BotAlgDeat} \quad \text{Equação (A-78)}$$

C.1. FOTOSSÍNTESE

Duas representações podem ser usadas para modelar a fotossíntese das algas de fundo. A primeira é baseada na reação de ordem zero corrigida da temperatura atenuada pela limitação da luz e de nutrientes:

$$\text{BotAlgPhoto} = C_{gb}(T)\phi_{Nb}\phi_{Lb} \quad \text{Equação (A-79)}$$

onde $C_{gb}(T)$ = taxa máxima de fotossíntese de ordem zero dependente da temperatura [gD/(m² d)], ϕ_{Nb} = fator de atenuação das algas de fundo [adimensional entre 0 e 1], e ϕ_{Lb} = coeficiente de atenuação da luz nas algas de fundo [adimensional 0 e 1].

A segunda representação utiliza um modelo de primeira ordem:

$$\text{BotAlgPhoto} = C_{gb}(T)\phi_{Nb}\phi_{Lb}\phi_{Sb}a_b \quad \text{Equação (A-80)}$$

onde, para esse caso, $C_{gb}(T)$ = taxa máxima de fotossíntese de primeira ordem dependente da temperatura [d⁻¹], e ϕ_{Sb} = fator de atenuação do espaço.

EFEITO DA TEMPERATURA: da mesma maneira que nas reações de primeira ordem, um modelo de Arrhenius é empregado para quantificar o efeito da temperatura na fotossíntese das algas de fundo:

$$\text{BotAlgPhoto} = C_{gb}(T)\phi_{Nb}\phi_{Lb}\phi_{Sb}a_b \quad \text{Equação (A-81)}$$

onde, para este caso, $C_{gb}(T)$ = é a taxa máxima de fotossíntese de primeira ordem dependente da temperatura [d⁻¹], e ϕ_{Sb} = fator de atenuação do espaço.

LIMITAÇÃO POR NUTRIENTE: o efeito da limitação por nutriente na fotossíntese das algas de fundo é modelado de maneira diferente da fotossíntese do fitoplâncton: ao invés de ser dependente da concentração de um nutriente externo, a taxa de fotossíntese é dependente dos nutrientes intracelulares através da formulação:

$$\phi_{Nb} = \min \left[1 - \frac{q_{0N}}{q_N}, 1 - \frac{q_{0P}}{q_P}, \frac{[\text{H}_2\text{CO}_3^*] + [\text{HCO}_3^-]}{k_{sCb} + [\text{H}_2\text{CO}_3^*] + [\text{HCO}_3^-]} \right] \quad \text{Equação (A-82)}$$

onde q_N e q_P = parcela de nitrogênio [mgN gD⁻¹] e fósforo [mgP gD⁻¹] nas células, respectivamente, q_{0N} e q_{0P} = parcelas mínimas de nitrogênio [mgN gD⁻¹] e fósforo [mgP gD⁻¹], e k_{sCb} = constante de meia saturação para as algas de fundo [mole/L]. A parcela mínima nas células são os níveis de nutrientes intracelulares onde o crescimento algal cessa.

As parcelas das células representam as razões entre o nutriente intracelular e o peso seco das plantas de fundo:

$$q_N = \frac{IN_b}{a_b} \quad \text{Equação (A-83)}$$

$$q_P = \frac{IP_b}{a_b} \quad \text{Equação (A-84)}$$

onde IN_b = concentração de nitrogênio intracelular [mgN/m²] e IP_b = concentração de fósforo intracelular [mgP/m²].

LIMITAÇÃO PELA LUZ: da mesma maneira que no fitoplâncton, três equações (A-68, A-70 e A-72) são usadas para caracterizar o impacto da luz na fotossíntese algal. Substituindo a equação A-78 nesses modelos, têm-se o coeficiente de atenuação da luz para as algas de fundo:

Modo de meia saturação da luz (Baly 1935):

$$\phi_{Lb} = \frac{I(0)e^{-k_e H}}{K_{Lb} + I(0)e^{-k_e H}} \quad \text{Equação (A-85)}$$

Função de Smith (Smith 1936):

$$\phi_{Lp} = \frac{I(0)e^{-k_e H}}{\sqrt{K_{Lb}^2 + (I(0)e^{-k_e H})^2}} \quad \text{Equação (A-86)}$$

Equação de Steele (Steele 1962):

$$\phi_{Lb} = \frac{I(0)e^{-k_e H}}{K_{Lb}} e^{1 + \frac{I(0)e^{-k_e H}}{K_{Lb}}} \quad \text{Equação (A-87)}$$

onde K_{Lb} = parâmetro apropriado da luz em relação às algas de fundo para cada modelo.

LIMITAÇÃO POR ESPAÇO: se um modelo de crescimento de primeira ordem é utilizado, então um termo deve ser incluído para impor a limitação de espaço nas algas de fundo:

$$\phi_{Sb} = 1 - \frac{a_b}{a_{b,max}} \quad \text{Equação (A-88)}$$

onde $a_{b,max}$ = capacidade de carga [gD/m²].

C.2. RESPIRAÇÃO

A respiração das algas inferiores é representada como uma reação de primeira ordem que é atenuada por baixas concentrações de oxigênio:

$$\text{BotAlgResp} = F_{oxb} [k_{rb,1}(T) a_b + k_{rb,2} \text{BotAlgPhoto}] \quad \text{Equação (A-89)}$$

onde $k_{rb,1}(T)$ = taxa de respiração dependente da temperatura [1/d], $k_{rb,2}$ = taxa constante de foto-respiração das algas inferiores [adimensional], e F_{oxb} = atenuação devido a baixas concentrações de oxigênio [adimensional]. Valores sugeridos de $k_{rb,1} = 0,042 \text{ d}^{-1}$ e $k_{rb,2} = 0,389$, que corresponde a 39% do crescimento verdadeiro.

C.3. MORTE

A morte das algas inferiores é representada como uma reação de primeira ordem:

$$\text{BotAlgDeath} = k_{db}(T) a_b \quad \text{Equação (A-90)}$$

onde $k_{db}(T)$ = taxa de morte das algas inferiores dependente da temperatura [1/d].

D. Detritos (m_o)

Os detritos (ou matéria orgânica particulada) aumentam com a morte das plantas e diminuem devido à dissolução e sedimentação:

$$S_{mo} = r_{da} \text{PhytoDeath} + \text{BotAlgDeath} - \text{DetrDiss} - \text{DetrSettl} \quad \text{Equação (A-91)}$$

onde:

$$\text{DetrDiss} = k_{dt}(T) m_o \quad \text{Equação (A-92)}$$

onde $k_{dt}(T)$ = taxa de dissolução dos detritos dependente da [1/d] e

$$\text{DetrSettl} = \frac{v_{dt}}{H} m_o \quad \text{Equação (A-93)}$$

onde v_{dt} = velocidade de sedimentação dos detritos [m/d].

E. DBO Carbonácea Lenta (c_s)

A DBO carbonácea lenta aumenta através da dissolução dos detritos e é perdida via hidrólise:

$$S_{cs} = r_{od} \text{DetrDiss} - \text{SlowCHydr} - \text{SlowCOxid} \quad \text{Equação (A-94)}$$

onde:

$$\text{SlowCHydr} = k_{hc}(T)c_s \quad \text{Equação (A-95)}$$

$$\text{SlowCOxid} = F_{oxcf} k_{dcs}(T)c_s \quad \text{Equação (A-96)}$$

sendo que $k_{hc}(T)$ = taxa de hidrólise da DBO carbonácea lenta dependente da temperatura [1/d], $k_{dcs}(T)$ = taxa de oxidação da DBO carbonácea rápida dependente da temperatura [1/d] e F_{oxcf} = atenuação devido às baixas concentrações de oxigênio [adimensional].

F. DBO Carbonácea Rápida (c_f)

Sofre aumento via hidrólise da DBO carbonácea lenta e é diminuída via oxidação e desnitrificação:

$$S_{cf} = \text{SlowCHydr} - \text{FastCOxid} - r_{ondn} \text{Denitr} + J_{\text{CH}_4,d} \frac{A_{st,i}}{V_i} \quad \text{Equação (A-97)}$$

Onde

$$\text{FastCOxid} = F_{oxcf} k_{dc}(T)c_f \quad \text{Equação (A-98)}$$

onde $k_{dc}(T)$ = taxa de oxidação da DBO carbonácea rápida dependente da temperatura [1/d] e F_{oxcf} = atenuação devido a baixos teores de oxigênio [adimensional]. O parâmetro r_{ondn} é a taxa de equivalentes de oxigênio perdida por nitrogênio na forma nitrato que é desnitrificada (Equação A-43). O termo DENITR é a taxa de desnitrificação [$\mu\text{gN/L/d}$]. O termo $J_{\text{CH}_4,d}$ é o fluxo de sedimento do metano dissolvido em equivalentes de oxigênio ($\text{gO}_2/\text{m}^2/\text{d}$) que será definido na seção 8.8.

Três formulações são usadas para representar a atenuação do oxigênio:

Meia-saturação:

$$F_{oxrp} = \frac{o}{K_{socf} + o} \quad \text{Equação (A-99)}$$

onde K_{socf} = constante de meia saturação para o efeito do oxigênio na DBO carbonácea rápida [mgO_2/L].

Exponencial:

$$F_{oxrp} = (1 - e^{-K_{socf}o}) \quad \text{Equação (A-100)}$$

onde K_{socf} = coeficiente exponencial para o efeito do oxigênio na DBO carbonácea rápida [L/mgO_2].

Meia saturação de segunda ordem:

$$F_{oxrp} = \frac{o^2}{K_{socf} + o^2} \quad \text{Equação (A-101)}$$

onde K_{socf} = constante de meia saturação para efeitos de segunda ordem do oxigênio na DBO carbonácea rápida [$\text{mgO}_2^2/\text{L}^2$].

G. Nitrogênio Orgânico (n_o)

O nitrogênio orgânico aumenta devido à morte das plantas e é diminuído via hidrólise e sedimentação.

$$S_{no} = r_{na} \text{PhytoDeath} + q_N \text{BotAlgDeath} - \text{ONHydr} - \text{ONSettl} \quad \text{Equação (A-102)}$$

A taxa de hidrólise do nitrogênio orgânico é computada como

$$\text{ONHydr} = k_{hn}(T)n_o$$

onde $k_{hn}(T)$ = taxa de hidrólise do nitrogênio orgânico dependente da temperatura [1/d].

$$\text{ONS}_{\text{Settl}} = \frac{v_{on}}{H} n_o$$

Equação (A-103)

onde v_{on} = velocidade de sedimentação do nitrogênio orgânico [m/d].

H. Nitrogênio Amoniacal (n_a)

O nitrogênio amoniacal aumenta devido à hidrólise do nitrogênio orgânico e respiração do fitoplâncton. É perdido via nitrificação e fotossíntese das plantas:

$$S_{na} = \text{ONHydr} + r_{na} \text{ PhytoResp} - \text{NH}_4\text{Nitrif} - r_{na} P_{ap} \text{ PhytoPhoto} \\ + [\text{J}_{\text{NH}_4} - P_{ab} \text{ BotAlgUptakeN} (\text{NUpWCfrac})] \frac{A_{st,i}}{V_i}$$

Equação (A-104)

A taxa da nitrificação da amônia é computada como

$$\text{NH}_4\text{Nitrif} = F_{oxna} k_n(T) n_a$$

Equação (A-105)

onde $k_n(T)$ = taxa de nitrificação do nitrogênio amoniacal dependente da temperatura [1/d] e F_{oxna} = atenuação devido a baixos teores de oxigênio [adimensional]. A atenuação do oxigênio é modelada pelas Equações A-99 à A-101 com a dependência do oxigênio representada pelo parâmetro K_{sona} .

Os coeficientes P_{ap} e P_{ab} são as preferências pela amônia como fonte de nitrogênio para o fitoplâncton e algas de fundo, respectivamente

$$P_{ap} = \frac{n_a n_n}{(k_{hnxp} + n_a)(k_{hnxp} + n_n)} + \frac{n_a k_{hnxp}}{(n_a + n_n)(k_{hnxp} + n_n)}$$

Equação (A-106)

$$P_{ab} = \frac{n_a n_n}{(k_{hnxb} + n_a)(k_{hnxb} + n_n)} + \frac{n_a k_{hnxb}}{(n_a + n_n)(k_{hnxb} + n_n)}$$

Equação (A-107)

onde k_{hnxp} = coeficiente de preferência do fitoplâncton pela amônia [mgN/m³] e k_{hnxb} = preferência das algas de fundo pela amônia [mgN/m³].

O termo J_{NH_4} é o fluxo de amônia do sedimento e será descrito na seção 8.8.

I. Amônia não ionizada

O modelo simula a amônia total, porém na água esta consiste em duas formas: ion amônio (NH_4^+) e amônia não ionizada (NH_3). Em pH entre 6 e 8, a maior parte da amônia total estará na forma iônica. Entretanto, em pH alto a amônia não ionizada predomina. O total de amônia não ionizada pode ser computado como:

$$n_{au} = F_u n_a$$

Equação (A-108)

onde n_{au} = é a concentração de amônia não ionizada [µgN/L], e F_u = é a fração da amônia total que está na forma não ionizada:

$$F_u = \frac{1}{1 + 10^{-\text{pH}} / K_a}$$

Equação (A-109)

onde K_a = é o coeficiente de equilíbrio para a reação de dissociação da amônia, que é relacionado com a temperatura por

$$\text{p}K_a = 0.09018 + \frac{2729.92}{T_a}$$

Equação (A-110)

onde T_a = é a temperatura absoluta [K] e $\text{p}K_a = -\log_{10}(K_a)$.

J. Nitrato (n_n)

O nitrato aumenta pela nitrificação da amônia e é diminuído pela desnitrificação e fotossíntese das plantas:

$$S_{ni} = \text{NH4Nitrif} - \text{Denitr} - r_{na} (1 - P_{ap}) \text{PhytoPhoto} + [\text{J}_{\text{NO}_3} - (1 - P_{ab}) \text{BotAlgUptakeN}(\text{NUpWCfrac})] \frac{A_{st,i}}{V_i} \quad \text{Equação (A-111)}$$

A taxa de desnitrificação é computada como:

$$\text{Denitr} = (1 - F_{oxdn}) k_{dn}(T) n_n \quad \text{Equação (A-112)}$$

onde $k_{dn}(T)$ = taxa de desnitrificação do nitrato dependente da temperatura [1/d] e F_{oxdn} = efeito de baixos teores de oxigênio na desnitrificação [adimensional] conforme modelado pelas Equações A-99 à A-101 com a dependência com o oxigênio sendo representada pelo parâmetro K_{sodn} .

O termo J_{NO_3} é o fluxo de nitrato do sedimento ($\text{mgN/m}^2/\text{d}$), conforme descrição na seção 8.8.

K. Fósforo orgânico (p_o)

O fósforo orgânico aumenta devido à morte das plantas e é perdido por hidrólise e sedimentação:

$$S_{po} = r_{pa} \text{PhytoDeath} + q_p \text{BotAlgDeath} - \text{OPHydr} - \text{OPSettl} \quad \text{Equação (A-113)}$$

Onde a taxa de hidrólise do fósforo orgânico é calculada como:

$$\text{OPHydr} = k_{hp}(T) p_o \quad \text{Equação (A-114)}$$

onde $k_{hp}(T)$ = taxa de hidrólise do fósforo orgânico dependente da temperatura [1/d]. A sedimentação do fósforo orgânico é determinada como:

$$\text{OPSettl} = \frac{v_{op}}{H} p_o \quad \text{Equação (A-115)}$$

onde v_{op} = velocidade de sedimentação do fósforo orgânico [m/d].

L. Fósforo inorgânico (p_i)

O fósforo inorgânico aumenta devido à hidrólise do fósforo orgânico e respiração do fitoplâncton, sendo diminuído via fotossíntese. Ademais uma perda por sedimentação é incluída para casos onde o fósforo inorgânico é perdido devido à sorção sobre a matéria particulada sedimentável com os oxihidróxidos de ferro:

$$S_{pi} = \text{DOPHydr} + r_{pa} \text{PhytoResp} - r_{pa} \text{PhytoPhoto} - \text{IPSettl} + [\text{J}_{\text{PO}_4} - \text{BotAlgUptakeP}(\text{PUpWCfrac})] \frac{A_{st,i}}{V_i} \quad \text{Equação (A-116)}$$

onde

$$\text{IPSettl} = \frac{v_{ip}}{H} p_i \quad \text{Equação (A-117)}$$

onde v_{ip} = velocidade de sedimentação do fósforo inorgânico [m/d].

A fração do fósforo absorvido da coluna d'água pelas algas de fundo é descrito por PUpWCfrac . Para o perífiton, o valor de PUpWCfrac é 1 uma vez que 100% da absorção dos nutrientes ocorre na coluna d'água. Para macrófitas o valor de PUpWCfrac deve ser menor que 1.

O termo J_{PO_4} é o fluxo de sedimento do fósforo inorgânico ($\text{mgP/m}^2/\text{d}$) que será definido na seção 8.8.

M. Sólidos Inorgânicos Totais (m_i)

Sólidos suspensos inorgânicos são perdidos por sedimentação:

$$S_{mi} = - \text{InorgSettl}$$

Equação (A-118)

onde:

$$\text{InorgSettl} = \frac{v_i}{H} m_i$$

Equação (A-119)

onde v_i = velocidade de sedimentação dos sólidos suspensos inorgânicos [m/d]

N. Oxigênio Dissolvido (o)

O oxigênio dissolvido (OD) aumenta devido à fotossíntese e é perdido pela oxidação da DBO carbonácea lenta e rápida, nitrificação, respiração das plantas e oxidação da matéria não-carbonácea e não-nitrogenada (Demanda Química de Oxigênio – DQOO). Dependendo se a água está supersaturada ou subsaturada, o OD pode aumentar ou diminuir pela reaeração:

$$S_o = r_{oa} (\text{PhytoPhoto} - \text{PhytoResp}) + r_{od} (\text{BotAlgPhoto} - \text{BotAlgResp}) \frac{A_{st,i}}{V_i}$$

Equação (A-120)

$$- r_{oc} \text{FastCOxid} - r_{oc} \text{SlowCOxid} - r_{on} \text{NH4Nitr} + \text{OxReaer} - \text{CODoxid} - \text{SOD} \frac{A_{st,i}}{V_i}$$

onde:

$$\text{OxReaer} = k_a(T) (o_s(T, elev) - o)$$

Equação (A-121)

onde $k_a(T)$ = coeficiente de reaeração dependente da temperatura [1/d], $o_s(T, elev)$ = concentração de saturação do oxigênio [mgO₂/L] em uma temperatura T , e uma elevação acima do nível do mar, $elev$. O termo CODoxid é a oxidação da DQO (mgO₂/L/d). SOD é a demanda de oxigênio do sedimento [gO₂/m²/d].

N.1. SATURAÇÃO DO OXIGÊNIO

As seguintes equações são usadas para representar a dependência da saturação do oxigênio em relação à temperatura:

$$\ln o_s(T, 0) = -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{T_a} - \frac{6,642308 \times 10^7}{T_a^2}$$

Equação (A-122)

$$+ \frac{1,243800 \times 10^{10}}{T_a^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{T_a^4}$$

onde $o_s(T, 0)$ = concentração de saturação do OD da água doce em uma pressão de 1 [mgO₂/L] e T_a = temperatura absoluta [K] onde $T_a = T + 273,15$.

O efeito da elevação é computado como:

$$o_s(T, elev) = e^{\ln o_s(T, 0)} (1 - 0,0001148elev)$$

Equação (A-123)

N.2. FÓRMULAS DE REAERAÇÃO

O coeficiente de reaeração a 20°C pode ser prescrito na aba "REACH". Se a reaeração não é prescrita então ela é computada como uma função da hidráulica do rio e, opcionalmente, pela velocidade do vento:

$$k_a(20) = k_{ah}(20) + \frac{K_{Lw}(20)}{H}$$

Equação (A-124)

onde $k_{ah}(20)$ = taxa de reaeração a 20 °C computada através características hidráulicas do rio [d⁻¹], $K_{Lw}(20)$ = coeficiente de transferência de massa baseado na velocidade do vento [m/d], e H = profundidade média [m].

N.3. FÓRMULAS BASEADAS NA HIDRÁULICA DO RIO

O'Connor-Dobbins (O'Connor and Dobbins 1958):

$$k_{ah}(20) = 3,93 \frac{U^{0,5}}{H^{1,5}} \quad \text{Equação (A-125)}$$

onde U = velocidade média [m/s] e H = profundidade média [m].

Churchill (Churchill et al. 1962):

$$k_{ah}(20) = 5,026 \frac{U}{H^{1,67}} \quad \text{Equação (A-126)}$$

Owens-Gibbs (Owens et al. 1964):

$$k_{ah}(20) = 5,32 \frac{U^{0,67}}{H^{1,85}} \quad \text{Equação (A-127)}$$

Tsivoglou-Neal (Tsivoglou e Neal 1976):

Para vazões baixas entre 0,0283 e 0,4247 m³/s:

$$k_{ah}(20) = 31,183 US \quad \text{Equação (A-128)}$$

Para vazões altas entre 0,4247 e 84,938 m³/s:

$$k_{ah}(20) = 15,308 US \quad \text{Equação (A-129)}$$

onde S = declividade do canal [m/m].

Thackston-Dawson (Thackston e Dawson 2001):

$$k_{ah}(20) = 2,16(1 + 9F^{0,25}) \frac{U_*}{H} \quad \text{Equação (A-130)}$$

onde U_* = velocidade de atrito [m/s], e F = número de Froude [adimensional]. A velocidade de atrito e o número de Froude são definidos como:

$$U_* = \sqrt{gR_h S} \quad \text{Equação (A-131)}$$

$$F = \frac{U}{\sqrt{gH_d}} \quad \text{Equação (A-132)}$$

onde g = aceleração da gravidade (9,81 m/s²), R_h = raio hidráulico [m], e H_d = profundidade hidráulica [m]. A profundidade hidráulica é definida como:

$$H_d = \frac{A_c}{B_t} \quad \text{Equação (A-133)}$$

onde B_t = é a largura de topo do canal [m].

USGS (Pool-riffle) (Melching e Flores 1999):

Vazões baixas, $Q < 0,556$ m³/s:

$$k_{ah}(20) = 517(US)^{0,524} Q^{-0,242} \quad \text{Equação (A-134)}$$

Vazões altas, $Q > 0,556$ m³/s:

$$k_{ah}(20) = 596(US)^{0,528} Q^{-0,136} \quad \text{Equação (A-135)}$$

onde Q = vazão (m³/s).

USGS (Channel-control) (Melching e Flores 1999):

Vazões baixas, $Q < 0,556$ m³/s:

$$k_{ah}(20) = 88(US)^{0,313} H^{-0,353} \quad \text{Equação (A-136)}$$

Vazões altas, $Q > 0,556 \text{ m}^3/\text{s}$:

$$k_{ah}(20) = 142(US)^{0,333} H^{-0,66} B_t^{-0,243} \quad \text{Equação (A-137)}$$

Interna (Covar 1976):

A reaeração também pode ser calculada internamente baseada no seguinte esquema padronizado da Figura A5:

- Se $H < 0,61 \text{ m}$, usa-se a fórmula de Owens-Gibbs
- Se $H > 0,61 \text{ m}$ e $H > 3,45U^{2,5}$, usa-se a fórmula de O'Connor-Dobbins
- Caso contrário usa-se a fórmula de Churchill

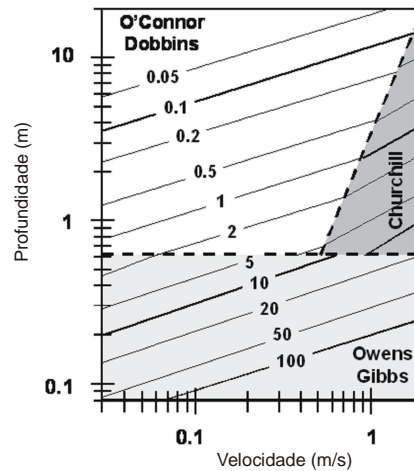


Figura A5 – Taxa de reaeração (d) versus a profundidade e a velocidade (Covar, 1976 apud Pelletier, 2008).

N.4. FÓRMULAS BASEADAS NO VENTO

Três opções estão disponíveis para incorporar os efeitos do vento na taxa de reaeração: (1) pode ser omitido, (2) fórmula de Banks-Herrera e (3) fórmula de Wanninkhor:

Fórmula de Banks-Herrera:

$$K_{lw} = 0,728U_{w,10}^{0,5} - 0,317U_{w,10} + 0,0372U_{w,10}^2 \quad \text{Equação (A-138)}$$

onde $U_{w,10}$ = velocidade do vento medido a 10 metros acima da superfície da água [m s^{-1}].

Fórmula de Wanninkhof:

$$K_{lw} = 0,0986U_{w,10}^{1,64} \quad \text{Equação (A-139)}$$

O modelo usa a Equação A-34 para corrigir a velocidade do vento na aba "METEOROLOGY" (7m acima da superfície da água).

N.5. EFEITOS DE ESTRUTURAS DE CONTROLE: OXIGÊNIO

A transferência de oxigênio em rios é influenciada pela presença de estruturas de controle como vertedouros, barragens, diques e cachoeiras (Figura A6). Butt e Evans (1983) apud Pelletier *et al* (2008) sugerem a seguinte fórmula:

$$r_d = 1 + 0,38a_d b_d H_d (1 - 0,11H_d)(1 + 0,046T) \quad \text{Equação (A-140)}$$

onde r_d = relação entre o déficit acima e abaixo da barragem, H_d = a diferença da cota do nível d'água [m], T = temperatura da água ($^{\circ}\text{C}$) e a_d e b_d são coeficientes de correção em relação à qualidade da água e a forma da barragem, sendo que o QUAL2Kw utiliza os valores de $a_d = 1,25$ e $b_d = 0,9$.

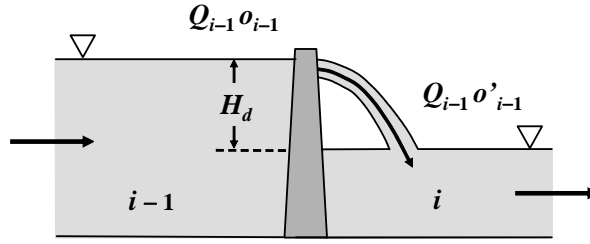


Figura A6 – Escoamento da água sobre uma estrutura de controle.

O balanço de massa para o trecho abaixo da estrutura é escrito como:

$$\frac{do_i}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} o'_{i-1} - \frac{Q_i}{V_i} o_i - \frac{Q_{ab,i}}{V_i} o_i + \frac{E'_i}{V_i} (o_{i+1} - o_i) + \frac{W_{o,i}}{V_i} + S_{o,i} \quad \text{Equação (A-140)}$$

onde o'_{i-1} = concentração de oxigênio que entra no trecho [mgO₂/L], sendo:

$$o'_{i-1} = o_{s,i-1} - \frac{o_{s,i-1} - o_{i-1}}{r_d} \quad \text{Equação (A-141)}$$

O. Patógenos (x)

Patógenos podem morrer e sedimentar:

$$S_x = -\text{PathDeath} - \text{PathSettl} \quad \text{Equação (A-142)}$$

O.1. MORTE

A morte de patógenos ocorre por processo natural e luz, sendo ela modelada na ausência de luz por uma equação de decaimento de primeira ordem dependente da temperatura e a taxa de morte devido à luz baseada na lei de Beer-Lambert:

$$\text{PathDeath} = k_{dx}(T)x + \alpha_{path} \frac{I(0)/24}{k_e H} (1 - e^{-k_e H}) x \quad \text{Equação (A-143)}$$

onde $k_{dx}(T)$ = taxa de morte dos patógenos dependente da temperatura [1/d] e α_{path} é uma constante para a mortalidade induzida pela luz (dia⁻¹ por ly/hora). Thomann (1987) sugere que o valor de α_{path} seja aproximadamente 1.

O.2. SEDIMENTAÇÃO

A sedimentação dos patógenos é representada como:

$$\text{PathSettl} = \frac{v_x}{H} x \quad \text{Equação (A-144)}$$

onde v_x = velocidade de sedimentação do patógeno [m/d].

P. Constituinte Genérico (gen)

O usuário pode optar em assumir que o constituinte genérico não tenha interação com as outras variáveis de estado ou ele pode ser tratado como a Demanda Química de Oxigênio não carbonácea e não nitrogenada (COD). Ele está sujeito ao decaimento de primeira ordem e a sedimentação:

$$S_{gen} = -k_{gen}(T)gen - \frac{v_{gen}}{H} gen \quad \text{Equação (A-145)}$$

onde $k_{gen}(T)$ = taxa de decaimento dependente da temperatura [1/d] e v_{gen} = velocidade de sedimentação [m/d]. Se ele for utilizado como COD, então sua taxa de oxidação (mgO₂/L/d) será determinada por:

$$\text{COD}_{\text{oxid}} = k_{gen}(T) \text{gen} \quad \text{Equação (A-146)}$$

onde *gen* está em unidades de mgO₂/L.

Q. pH

As seguintes equações de equilíbrio, balanço de massa e eletroneutralidade definem a água doce dominada pelo carbono inorgânico:

$$K_1 = \frac{[\text{HCO}_3^-][\text{H}^+]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]} \quad \text{Equação (A-147)}$$

$$K_2 = \frac{[\text{CO}_3^{2-}][\text{H}^+]}{[\text{HCO}_3^-]} \quad \text{Equação (A-148)}$$

$$K_w = [\text{H}^+][\text{OH}^-] \quad \text{Equação (A-149)}$$

$$c_T = [\text{H}_2\text{CO}_3^*] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] \quad \text{Equação (A-150)}$$

$$\text{Alk} = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{OH}^-] - [\text{H}^+] \quad \text{Equação (A-151)}$$

onde K_1 , K_2 e K_w são constante de acidez, Alk = alcalinidade [eq L⁻¹], H_2CO_3^* = a soma do dióxido de carbono dissolvido e o ácido carbônico, HCO_3^- = íon bicarbonato, CO_3^{2-} = íon carbonato, H^+ = íon hidrogênio, OH^- = íon hidroxila, e c_T = concentração do carbono inorgânico total [mole L⁻¹]. Os parênteses [] designam concentrações moleculares.

Para cálculos internos a alcalinidade é expressa em unidade de eq/L, sendo que para entradas e saídas é expressa em mgCaCO₃/L. As constantes de equilíbrio são relacionadas por:

Harned and Hamer (1933):

$$\text{p}K_w = \frac{4787,3}{T_a} + 7,1321 \log_{10}(T_a) + 0,010365T_a - 22,80 \quad \text{Equação (A-152)}$$

Plummer e Busenberg (1982):

$$\log K_1 = -356,3094 - 0,06091964T_a + 2183437/T_a + 126,8339 \log T_a - 1.684,915/T_a^2 \quad \text{Equação (A-153)}$$

Plummer and Busenberg (1982):

$$\log K_2 = -107.8871 - 0.03252849T_a + 5151.79/T_a + 38.92561 \log T_a - 563,713.9/T_a^2 \quad \text{Equação (A-154)}$$

O sistema não linear de cinco equações simultâneas (A-147 à A-151) pode ser resolvido numericamente para cinco incógnitas: [H₂CO₃*], [HCO₃⁻], [CO₃²⁻], [OH⁻], e {H⁺}. A solução adotada pelo QUAL2Kw é através da combinação das Equações A-152, A-153 e A-154 para a definição dos seguintes parâmetros:

$$\alpha_0 = \frac{[\text{H}^+]^2}{[\text{H}^+]^2 + K_1[\text{H}^+] + K_1K_2} \quad \text{Equação (A-155)}$$

$$\alpha_1 = \frac{K_1[\text{H}^+]}{[\text{H}^+]^2 + K_1[\text{H}^+] + K_1K_2} \quad \text{Equação (A-156)}$$

$$\alpha_2 = \frac{K_1K_2}{[\text{H}^+]^2 + K_1[\text{H}^+] + K_1K_2} \quad \text{Equação (A-157)}$$

onde α_0 , α_1 , e α_2 = fração do carbono inorgânico total no dióxido de carbono, bicarbonato, e carbonato, respectivamente. As equações A-155, A-156 e A-157 podem ser combinadas e gerar:

$$\text{Alk} = (\alpha_1 + 2\alpha_2)c_T + \frac{K_w}{[\text{H}^+]} - [\text{H}^+] \quad \text{Equação (A-158)}$$

Dessa maneira, resolvendo para o pH reduz-se a determinar a raiz, $\{\text{H}^+\}$, de:

$$f([\text{H}^+]) = (\alpha_1 + 2\alpha_2)c_T + \frac{K_w}{[\text{H}^+]} - [\text{H}^+] - \text{Alk} \quad \text{Equação (A-159)}$$

onde o pH é então calculado por:

$$\text{pH} = -\log_{10}[\text{H}^+] \quad \text{Equação (A-160)}$$

A raiz da Equação A-160 é determinada através de um método numérico, sendo que o usuário pode seleccionar entre o método de Newton-Raphson ou o método da bissecção. O primeiro é mais rápido e é o default do QUAL2k, porém às vezes pode divergir nos resultados. Nesses casos, por ser mais estável, o método da bissecção seria preferível.

R. Carbono Inorgânico Total (c_T)

A concentração de carbono inorgânico total aumenta devido à oxidação rápida do carbono e da respiração das plantas, sendo perdido via fotossíntese. Dependendo da saturação (insaturada ou supersaturada) da água em relação ao CO_2 , pode aumentar ou diminuir via reaeração:

$$S_{c_T} = r_{cco}\text{FastCOxid} + r_{cca}(\text{PhytoResp} - \text{PhytoPhot}) \quad \text{Equação (A-161)}$$

$$+ r_{ccd}(\text{BotAlgRep} - \text{BotAlgPhoo}) \frac{A_{st,i}}{V_i} + \text{CO2Reaer}$$

onde:

$$\text{CO2Reaer} = k_{ac}(T)([\text{CO}_2]_s - \alpha_0 c_T) \quad \text{Equação (A-162)}$$

onde $k_{ac}(T)$ = coeficiente de reaeração do dióxido de carbono dependente da temperatura [1/d], e $[\text{CO}_2]_s$ = concentração de saturação do dióxido de carbono [mole/L].

Os coeficientes de estequiometria são derivados da Equação A-44:

$$r_{cca} = r_{ca} \left(\frac{\text{gC}}{\text{mgA}} \right) \times \frac{\text{moleC}}{12 \text{ gC}} \times \frac{\text{m}^3}{1000\text{L}} \quad \text{Equação (A-163)}$$

$$r_{ccd} = r_{cd} \left(\frac{\text{gC}}{\text{gD}} \right) \times \frac{\text{moleC}}{12 \text{ gC}} \times \frac{\text{m}^3}{1000\text{L}} \quad \text{Equação (A-164)}$$

$$r_{cco} = \frac{1}{r_{oc}} \left(\frac{\text{gC}}{\text{gO}_2} \right) \frac{\text{moleC}}{12 \text{ gC}} \times \frac{\text{m}^3}{1000 \text{ L}} \quad \text{Equação (A-165)}$$

R.1. SATURAÇÃO DO DIÓXIDO DE CARBONO

A saturação do dióxido de carbono é computada através da Lei de Henry:

$$[\text{CO}_2]_s = K_H p_{\text{CO}_2} \quad \text{Equação (A-166)}$$

onde K_H = constante de Henry [mole (L atm)^{-1}] e p_{CO_2} = pressão parcial do dióxido de carbono na atmosfera [atm], sendo uma entrada na aba "RATES" em ppm. O programa converte internamente ppm para atm usando o fator de conversão de 10^{-6} atm/ppm.

O valor de K_H pode ser calculado em função da temperatura por:

$$pK_H = -\frac{2385,73}{T_a} - 0,015264T_a + 14,0184 \quad \text{Equação (A-167)}$$

R.2. TRANSFERÊNCIA DO DIÓXIDO DE CARBONO (CO₂)

O coeficiente de reaeração do CO₂ pode ser computado a partir da taxa de reaeração do oxigênio por:

$$k_{ac}(20) = \left(\frac{32}{44} \right)^{0,25} k_a(20) = 0,923 k_a(20) \quad \text{Equação (A-168)}$$

R.3. EFEITO DAS ESTRUTURAS DE CONTROLE NO CO₂

A transferência do CO₂ em rios pode ser influenciada por estruturas de controle e o QUAL2Kw assume que o CO₂ se comporta de maneira semelhante ao OD. Então, o balanço de massa do carbono inorgânico para o trecho imediatamente a jusante da estrutura é escrita como:

$$\frac{dc_{T,i}}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} c'_{T,i-1} - \frac{Q_i}{V_i} c_{T,i} - \frac{Q_{ab,i}}{V_i} c_{T,i} + \frac{E_i}{V_i} (c_{T,i+1} - c_{T,i}) + \frac{W_{cT,i}}{V_i} + S_{cT,i} \quad \text{Equação (A-169)}$$

onde $c'_{T,i-1}$ = concentração do carbono inorgânico que entra no trecho [mgO₂/L], onde:

$$c'_{T,i-1} = (\alpha_1 + \alpha_2) c_{T,i-1} + CO_{2,s,i-1} - \frac{CO_{2,s,i-1} - \alpha_0 c_{T,i-1}}{r_d} \quad \text{Equação (A-170)}$$

onde r_d é calculado pela Equação A-140.

S. Alcalinidade (Alk)

As mudanças da alcalinidade computadas pela QUAL2Kw são devidas à fotossíntese e a respiração das plantas, hidrólise do fósforo e nitrogênio, nitrificação e desnitrificação pela Equação:

$$\begin{aligned} S_{alk} = & \left(-r_{alkaa} P_{ap} + r_{alkan} (1 - P_{ap}) \right) \text{PhytoPhoto} + r_{alkaa} \text{PhytoResp} \\ & + r_{alkbn} \text{ONHydr} + r_{alkbp} \text{OPHydr} - r_{alkn} \text{NH4Nitr} + r_{alkden} \text{Denitr} \\ & + [r_{alkbn} (1 - P_{ap}) \text{BotAlgUptakeN} - r_{alkbn} P_{ap} \text{BotAlgUptakeN} - r_{alkbp} \text{BotAlgUptakeP}] \frac{A_{st,i}}{V_i} \end{aligned} \quad \text{Equação (A-171)}$$

onde os r 's são as relações que traduzem os processos em valores correspondente de alcalinidade. Os coeficientes estequiométricos são provenientes das Equações A-40 à A-43 conforme:

Fotossíntese do Fitoplâncton (Amônia como substrato) e Respiração:

$$r_{alkaa} = r_{ca} \left(\frac{\text{gC}}{\text{mgA}} \right) \times \frac{14 \text{ eqH}^+}{106 \text{ moleC}} \times \frac{\text{moleC}}{12 \text{ gC}} \times \frac{\text{m}^3}{1000 \text{ L}} \quad \text{Equação (A-172)}$$

Fotossíntese do Fitoplâncton (Nitrato como substrato):

$$r_{alkan} = r_{ca} \left(\frac{\text{gC}}{\text{mgA}} \right) \times \frac{18 \text{ eqH}^+}{106 \text{ moleC}} \times \frac{\text{moleC}}{12 \text{ gC}} \times \frac{\text{m}^3}{1000 \text{ L}} \quad \text{Equação (A-173)}$$

Absorção do Nitrogênio pelas Algas de Fundo e Hidrólise do Nitrogênio:

$$r_{alkbn} = \frac{16 \text{ eqH}^+}{16 \text{ moleN}} \times \frac{\text{moleN}}{14 \text{ gN}} \times \frac{\text{gN}}{1000 \text{ mgN}} \times \frac{\text{m}^3}{1000 \text{ L}} \quad \text{Equação (A-174)}$$

Absorção do Fósforo pelas Algas de Fundo e Hidrólise do Fósforo:

$$r_{alkbp} = \frac{2 \text{ eqH}^+}{1 \text{ moleP}} \times \frac{\text{moleP}}{31 \text{ gP}} \times \frac{\text{gP}}{1000 \text{ mgP}} \times \frac{\text{m}^3}{1000 \text{ L}} \quad \text{Equação (A-175)}$$

Nitrificação:

$$r_{alkn} = \frac{2 \text{ eqH}^+}{1 \text{ moleN}} \times \frac{\text{moleN}}{14 \text{ gN}} \times \frac{1 \text{ gN}}{1000 \text{ mgN}} \times \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \quad \text{Equação (A-176)}$$

Desnitrificação:

$$r_{alkden} = \frac{4 \text{ eqH}^+}{1 \text{ moleN}} \times \frac{\text{moleN}}{14 \text{ gN}} \times \frac{1 \text{ gN}}{1000 \text{ mgN}} \times \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \quad \text{Equação (A-177)}$$

9.6. Reações constituintes na água intersticial da zona hiporreica (Nível 1)

A opção "Nível 1" para os constituintes da água intersticial hiporreica no QUAL2Kw inclui a simulação da oxidação de ordem zero ou primeira ordem da DBO carbonácea rápida com atenuação da temperatura, DBO carbonácea e OD. O Nível 1 não inclui a simulação do biofilme de bactérias heterotróficas como uma variável de estado e, ao invés disto, o crescimento líquido do biofilme é estimado pela inserção de uma taxa de oxidação da DBO carbonácea rápida de ordem zero ou primeira ordem que é atenuada pela temperatura, OD e DBO carbonácea rápida.

A. Substância Conservativa (s)

Substâncias conservativas, por definição, não sofrem reações, então o ganho ou perda líquidos na zona de sedimento hiporreica ($S_{s,2}$) é calculado como:

$$S_{s,2} = 0 \quad \text{Equação (A-178)}$$

B. Fitoplâncton (a_p)

O fitoplâncton sofre perda por respiração e morte, sendo que o saldo líquido no sedimento da zona hiporreica ($S_{sp,2}$) é calculado como:

$$S_{sp,2} = -\text{PhytoResp}_2 - \text{PhytoDeath}_2 \quad \text{Equação (A-179)}$$

B.1. RESPIRAÇÃO

A respiração do fitoplâncton é representada como uma taxa de primeira ordem que é atenuada em baixas concentrações de oxigênio, sendo ela calcula na zona de sedimento hiporreica como:

$$\text{PhytoResp}_2 = F_{oxrp,2} k_{rp}(T) a_{p,2} \quad \text{Equação (A-180)}$$

onde $k_{rp}(T)$ = taxa de respiração do fitoplâncton dependente da temperatura [1/d] ($T_{1,2}$ é utilizado para o ajuste da temperatura de todas as taxas na zona de sedimento hiporreica de um trecho) e $F_{oxrp,2}$ = atenuação na zona hiporreica devido a baixas concentrações de oxigênio. A atenuação do oxigênio é modelada pelas Equações A-99 à A-101.

B.2. MORTE

A morte do fitoplâncton na zona de sedimento hiporreica é representada como uma taxa de primeira ordem:

$$\text{PhytoDeath}_2 = k_{dp}(T)a_{p,2} \quad \text{Equação (A-181)}$$

onde $k_{dp}(T)$ = taxa de morte do fitoplâncton dependente da temperatura [1/d].

C. Crescimento líquido de bactérias heterotróficas no sedimento hiporreica

O crescimento líquido de bactérias heterotróficas no sedimento hiporreica pode ser simulado através de taxa de ordem zero ou primeira ordem a ser selecionada na aba "RATES", sendo que para ordem zero:

$$\text{HeteroGrow} = C_{gh}(T)\phi_{Nh}r_{do} \quad \text{Equação (A-182)}$$

onde $C_{gh}(T)$ = taxa de oxidação da DBO carbonácea rápida pelas bactérias heterotróficas fixas [$\text{gO}_2\text{m}^{-2}\text{d}^{-1}$], e ϕ_{Nh} = fator de atenuação devido à concentração de DBO carbonácea rápida e OD [adimensional entre 0 e 1], e r_{do} é a relação estequiométrica entre o peso seco do material orgânico da bactéria e o oxigênio [g peso seco/gO_2], conforme apresentado na seção de Estequiometria da Matéria Orgânica (seção 8.4).

Se uma taxa de primeira ordem é selecionada, então a seguinte Equação representa o crescimento líquido das bactérias heterotróficas:

$$\text{HeteroGrow} = k_{gh}(T)\phi_{Nh}c_{f,2}r_{do} \frac{V_{2,i}}{A_{st,i}} \quad \text{Equação (A-183)}$$

onde $k_{gh}(T)$ = taxa máximas de oxidação da DBO carbonácea rápida em uma temperatura T devido às bactérias heterotróficas fixas [d^{-1}], e ϕ_{Nh} = fator de atenuação devido à concentração da DBO carbonácea rápida e OD [adimensional entre 0 e 1], $c_{f,2}$ é a concentração da DBO carbonácea na água da zona hiporreica [gO_2/m^3], r_{do} é a relação estequiométrica entre o peso seco e o equivalentes de oxigênio [g peso seco/gO_2], $V_{2,i}$ é o volume da água da zona hiporreica no elemento i [m^3], e $A_{st,i}$ é a área da superfície do elemento i [m^2].

Efeito da Temperatura: conforme as reações de primeira ordem descritas na coluna d'água na seção Efeitos da Temperatura nas Reações (seção 8.3), um modelo de Arrhenius é empregado para quantificar o efeito da temperatura se um modelo de oxidação de ordem zero é selecionado:

$$C_{gh}(T) = C_h(20)\theta^{T-20} \quad \text{Equação (A-184)}$$

Limitação por Nutriente e Substrato: as equações de Michaelis-Menten (Equação A-66) são usadas para representar a atenuação da oxidação devido à DBO carbonácea rápida. Três formulações são usadas para representar a atenuação do oxigênio, sendo que o valor mínimo é então usado para computar o coeficiente de atenuação do nutriente:

$$\phi_{Nh} = \min\left(\frac{c_{f,2}}{k_{sCh} + c_{f,2}}, F_{oxrh}\right) \quad \text{Equação (A-185)}$$

onde k_{sNh} = constante de meia saturação do nitrogênio [$\mu\text{gN/L}$] e k_{sPh} = constante de meia saturação do fósforo [$\mu\text{gP/L}$], k_{sCh} = constante de meia saturação do da DBO carbonácea rápida dissolvida (mgO_2/L), e F_{oxrh} = fator de atenuação do oxigênio [adimensional entre 0 e 1].

D. Detritos (m_o)

Os detritos ou matéria orgânica particulada (POM) aumentam devido à morte das plantas e diminuem em função da dissolução na água da zona hiporreica. O saldo líquido da zona de sedimento hiporreica ($S_{mo,2}$) é calculado como:

$$S_{mo,2} = r_{da} \text{PhytoDeath}_2 - \text{DetrDiss}_2 \quad \text{Equação (A-186)}$$

onde:

$$\text{DetrDiss}_2 = k_{dc}(T)m_{o,2} \quad \text{Equação (A-187)}$$

onde $k_{dc}(T)$ = taxa de dissolução dos detritos dependente da temperatura [1/d].

E. DBO carbonácea lenta (C_s)

A DBO carbonácea lenta aumenta devido à dissolução dos detritos e é diminuída via hidrólise. O saldo na zona de sedimento hiporreica ($S_{cs,2}$) é calculado como:

$$S_{cs,2} = r_{cd} \text{DetrDiss}_2 - \text{SlowCHydr}_2 - \text{SlowCOxid}_2 \quad \text{Equação (A-188)}$$

onde:

$$\text{SlowCHydr}_2 = k_{hc}(T)c_{s,2} \quad \text{Equação (A-189)}$$

$$\text{SlowCOxid}_2 = F_{oxcf} k_{dcs}(T)c_{s,2} \quad \text{Equação (A-190)}$$

onde $k_{hc}(T)$ = taxa de hidrólise da DBO carbonácea lenta dependente da temperatura [1/d], $k_{dcs}(T)$ = taxa de oxidação da DBO carbonácea rápida dependente da temperatura [1/d] e F_{oxcf} = atenuação devido a baixas concentrações de oxigênio [adimensional].

F. DBO carbonácea rápida (C_f)

A DBO carbonácea rápida é aumentada via hidrólise da DBO carbonácea lenta e é diminuída pela oxidação das bactérias suspensas, oxidação do biofilme das bactérias heterotróficas e desnitrificação. O saldo dessa DBO ($S_{cf,2}$) na zona de sedimento hiporreica é calculado como:

$$S_{cf,2} = \text{SlowCHydr}_2 - \text{FastCOxid}_2 - r_{od} \text{HeteroGrow} \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} - r_{ondn} \text{Denitr}_2 \quad \text{Equação (A-191)}$$

A oxidação das bactérias suspensas na zona de sedimento hiporreica é representada como:

$$\text{FastCOxid}_2 = F_{oxcf,2} k_{cf}(T)c_{f,2} \quad \text{Equação (A-192)}$$

onde $k_{cf}(T)$ = taxa de oxidação do carbono rápida dependente da temperatura [1/d] e F_{oxcf} = atenuação devido a baixas concentrações de oxigênio [adimensional]. A atenuação do oxigênio (F_{oxcf}) é representada através da dependência do oxigênio (representada pelo parâmetro K_{soxf}) com o O_2 na zona hiporreica. O parâmetro r_{ondn} é a relação de equivalentes de oxigênio do carbono perdido por nitrito que é desnitrificado. O termo Denitr_2 é a taxa de desnitrificação [$\mu\text{gN/L/d}$].

G. Nitrogênio Orgânico (n_o)

O nitrogênio orgânico aumenta devido à dissolução dos detritos e é perdido por hidrólise. O saldo líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{no,2}$) é calculado como:

$$S_{no,2} = r_{nd} \text{DetrDiss}_2 - \text{ONHydr}_2 \quad \text{Equação (A-193)}$$

A taxa de hidrólise é calculada como:

$$\text{ONHydr}_2 = k_{hn}(T)n_{o,2} \quad \text{Equação (A-194)}$$

onde $k_{hn}(T)$ = taxa de hidrólise do nitrogênio orgânico dependente da temperatura [1/d].

H. Nitrogênio Amoniacal (n_a)

O nitrogênio amoniacal aumenta devido à hidrólise do nitrogênio orgânico e respiração do fitoplâncton, sendo diminuída via nitrificação. O saldo líquido da zona de sedimento hiporreica ($S_{na,2}$) é calculado como:

$$S_{na,2} = \text{ONHydr}_2 + r_{na} \text{PhytoResp}_2 - \text{NH4Nitrif}_2 \quad \text{Equação (A-195)}$$

A taxa de nitrificação da amônia é computada como:

$$\text{NH4Nitrif}_2 = F_{oxna,2} k_{na}(T)n_{a,2} \quad \text{Equação (A-196)}$$

onde $k_{na}(T)$ = taxa de nitrificação do nitrogênio amoniacal dependente da temperatura [1/d] e F_{oxna} = atenuação devido a baixas concentrações de oxigênio [adimensional]. A atenuação do oxigênio é modelada através da dependência com o oxigênio representada pelo parâmetro K_{sona} .

I. Nitrato (n_n)

O nitrato aumenta pela nitrificação da amônia e é perdido por desnitrificação. O saldo líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{nn,2}$) é calculado como:

$$S_{nn,2} = \text{NH4Nitrif}_2 - \text{Denitr}_2 \quad \text{Equação (A-197)}$$

A taxa de desnitrificação é computada como:

$$\text{Denitr}_2 = \frac{c_{f,2}}{0.1 + c_{f,2}} (1 - F_{oxdn,2}) k_{dn}(T) n_{n,2} \quad \text{Equação (A-198)}$$

onde $k_{dn}(T)$ = taxa de desnitrificação do nitrato dependente da temperatura [1/d] e F_{oxdn} = efeito de baixas concentrações de oxigênio na desnitrificação [adimensional] conforme modelado através da dependência com o oxigênio representado pelo parâmetro K_{sodn} .

J. Fósforo Orgânico (p_o)

O fósforo orgânico aumenta pela dissolução dos detritos e é perdido via hidrólise. O saldo líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{po,2}$) é calculado como:

$$S_{po,2} = r_{pd} \text{DetrDiss}_2 - \text{OPHydr}_2 \quad \text{Equação (A-199)}$$

onde:

$$\text{OPHydr}_2 = k_{hp}(T) p_{o,2} \quad \text{Equação (A-200)}$$

onde $k_{hp}(T)$ = taxa de hidrólise do fósforo orgânico dependente da temperatura [1/d].

K. Fósforo Inorgânico (p_i)

O fósforo inorgânico na zona do sedimento hiporreica aumenta pela hidrólise do fósforo orgânico e respiração do fitoplâncton. O ganho líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{pi,2}$) é calculado como:

$$S_{pi,2} = \text{OPHydr}_2 + r_{pa} \text{PhytoResp}_2 \quad \text{Equação (A-201)}$$

L. Oxigênio Dissolvido (o)

O oxigênio dissolvido é perdido pela oxidação da DBO carbonácea rápida e lenta pelas bactérias suspensas e o e pelo efeito líquido do crescimento e respiração as bactérias heterotróficas. É também perdido devido à nitrificação, respiração do fitoplâncton e oxidação da demanda química de oxigênio (COD) não carbonácea e não nitrogenada. A perda do oxigênio dissolvido da zona de sedimento hiporreica ($S_{o,2}$) é calculada como:

$$S_{o,2} = -\text{SlowCOxid}_2 - \text{FastCOxid}_2 - r_{od} \text{HeteroGrow} \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} - r_{on} \text{NH4Nitr}_2 - r_{oa} \text{PhytoResp}_2 - \text{CODoxid}_2 \quad \text{Equação (A-202)}$$

O termo CODoxid_2 é a DQO ($\text{mgO}_2/\text{L/d}$) que será definida na seção do constituinte genérico.

M. Patógeno (x)

Os patógenos estão sujeitos à morte na zona do sedimento hiporreica ($S_{x,2}$). A sua perda na é computada como:

$$S_{x,2} = -\text{PathDeath}_2 \quad \text{Equação (A-203)}$$

A morte dos patógenos é devido a um processo natural e essa morte na ausência de luz é modelada como uma taxa de decaimento de primeira ordem dependente da temperatura:

$$\text{PathDeath}_2 = k_{dx}(T)x_2 \quad \text{Equação (A-204)}$$

onde $k_{dx}(T)$ = taxa de morte natural do patógeno dependente da temperatura [1/d].

N. Constituinte Genérico (*gen*)

É representado no Nível 1 da mesma forma quando a zona de sedimento hiporreica é desconsiderada:

$$S_{gen,2} = -k_{gen}(T)gen_2 \quad \text{Equação (A-205)}$$

Onde $k_{gen}(T)$ = taxa de decaimento dependente da temperatura [1/d]. No caso onde o constituinte genérico é a COD, passa a ser determinado por:

$$\text{CODoxid}_2 = k_{gen}(T)gen \quad \text{Equação (A-206)}$$

onde *gen* está em unidades de mgO₂/L.

O. pH

As equações de equilíbrio, balanço de massa e eletroneutralidade são descritas da mesma forma quando zona de sedimento hiporreica é desconsiderada (seção 8.5).

P. Carbono Inorgânico Total (*c_T*)

A concentração do carbono inorgânico aumenta devido à oxidação rápida das bactérias suspensas e do crescimento das bactérias heterotróficas. Também é aumentado devido à respiração do fitoplâncton. O saldo líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{cT,2}$) é calculado como:

$$S_{cT,2} = r_{cco}\text{SlowCOxid}_2 + r_{cco}\text{FastCOxid}_2 + r_{ccd}\text{HeteroGrow} \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} + r_{cca}\text{PhytoResp}_2 \quad \text{Equação (A-207)}$$

Os coeficientes de estequiometria são derivados da condição quando zona de sedimento hiporreica é desconsiderada (seção 8.5, ítem R – Carbono Inorgânico Total).

Q. Alcalinidade (*Alk*)

As mudanças na alcalinidade na zona hiporreica são devido à respiração do fitoplâncton, nitrificação e desnitrificação; o saldo líquido para a zona de sedimento hiporreica é calculado como:

$$S_{alk,2} = r_{alkaa}\text{PhytoResp}_2 - r_{alkn}\text{NH4Nitr}_2 + r_{alkdn}\text{Denitr}_2 \quad \text{Equação (A-208)}$$

onde os *r*'s são as relações que convertem os processos em quantidades de alcalinidade correspondentes, sendo eles derivados da condição quando zona de sedimento hiporreica é desconsiderada (seção 8.5, ítem S – Alcalinidade).

9.7. Reações constituintes na água intersticial da zona hiporreica (Nível 2)

O metabolismo dos microorganismos nas zonas hiporreica de rios e córregos pode influenciar as concentrações de nutrientes, carbono e oxigênio dissolvido nas camadas sobrejacentes da coluna d'água.

Naegeli (1997) apud Pelletier *et al* (2008) reportaram taxas de respiração que variaram de 3,9 a 5,9 gO₂ m⁻² d⁻¹ e contribuíram em uma faixa de 76-96% do total da respiração do ecossistema de um rio de leito de cascalhos de sexta ordem na Suíça.

Grim e Fischer (1984) apud Pelletier *et al* (2008) descobriram que a respiração em sedimentos da zona hiporreica contabilizou pelo menos metade de toda a respiração em um córrego de quarta ordem no Arizona.

Mulholland *et al.* (1997) apud Pelletier *et al* (2008) mostraram que as taxas de respiração do ecossistema e as taxas de absorção de nutrientes são fortemente relacionadas com a taxa de transferência de água entre a superfície da água e a zona hiporreica.

A matéria orgânica na zona hiporreica pode ser atribuída por três grandes fatores: o manto de plantas, biofilme e a fauna presente nos sedimentos (Spacil e Rulik, 1997 apud Pelletier *et al* 2008). A maior parte da biomassa da comunidade hiporreica é devida ao crescimento do biofilme heterotrófico, sendo que esse crescimento envolve o consumo de carbono orgânico, absorção de nutrientes e OD e excreção de carbono inorgânico. A respiração endógena de organismos heterotróficos envolvem a absorção de OD e excreção de nutrientes e, a morte destes, contribui para o aumento de detritos (POM) no ecossistema (Leitchfried, 1991 apud Pelletier, 2008).

O Nível 2 do QUAL2Kw inclui a simulação do crescimento do biofilme de bactérias heterotróficas (ordem zero ou primeira ordem), respiração e morte, com atenuação do crescimento pela temperatura, carbono orgânico dissolvido, OD, amônia, nitrato e fósforo inorgânico. Ademais, esse Nível simula a concentração de bactérias heterotróficas na zona hiporreica como uma variável de estado.

A. Substância Conservativa (s)

Por definição, as substâncias conservativas não estão sujeitas a reações. Então o saldo líquido na zona do sedimento hiporreica ($S_{s,2}$) é calculado como:

$$S_{s,2} = 0 \quad \text{Equação (A-209)}$$

B. Fitoplâncton (a_p), DBO carbonácea lenta (c_s), DBO carbonácea rápida (c_r), nitrogênio orgânico (n_o), fósforo orgânico (p_o), patógeno (x), constituinte genérico (gen) e pH

O QUAL2Kw simula essas variáveis de estado no Nível 2 da mesma maneira em relação ao Nível 1, utilizando-se das mesmas equações e parâmetros.

C. Bactérias heterotróficas no sedimento hiporreica (a_h)

A opção Nível 2 simula o crescimento das bactérias heterotróficas no sedimento da zona hiporreica devido ao consumo de carbono orgânico dissolvido rapidamente consumível. Esse grupo de bactérias utiliza o oxigênio no seu crescimento e representa uma amostra diversa de espécies de microrganismos que são diminuídos por respiração e morte:

$$S_{ah} = \text{HeteroGrow} - \text{HeteroResp} - \text{HeteroDeath} \quad \text{Equação (A-210)}$$

C.1. Crescimento

A representação do crescimento das bactérias heterotróficas é baseada na correção de temperatura e na taxa de ordem zero ou primeira ordem atenuada por nutrientes e condições do substrato.

Na aba "RATES" do QUAL2Kw é permitido que o usuário selecione a ordem do modelo de crescimento e o crescimento máximo apropriado. Ao selecionar um modelo de ordem zero, tal crescimento será calculado por:

$$\text{HeteroGrow} = C_{gh}(T) \phi_{Nh} r_{do} \quad \text{Equação (A-211)}$$

onde $C_{gh}(T)$ = taxa máxima de crescimento do biofilme de bactérias heterotróficas dependente da temperatura [em termos de quantidades equivalentes de oxigênio oxidado $\text{gO}_2\text{m}^{-2}\text{d}^{-1}$], e ϕ_{Nh} = fator de atenuação do nutriente/substrato em relação às bactérias heterotróficas [adimensional entre 0 e 1].

Se um modelo de crescimento de primeira ordem é especificado, então o QUAL2Kw usa a seguinte equação:

$$\text{HeteroGrow} = k_{gh}(T) \phi_{Nh} \phi_{Sh} a_h \quad \text{Equação (A-212)}$$

onde $k_{gh}(T)$ = taxa máxima de crescimento do biofilme de bactérias heterotróficas em uma temperatura T [d^{-1}], e ϕ_{Nh} = fator de atenuação do nutriente/substrato em relação às bactérias heterotróficas [adimensional entre 0 e 1] e ϕ_{Sh} = fator de atenuação da limitação de espaço do biofilme.

Efeito da temperatura: O efeito da temperatura no crescimento das bactérias heterotróficas é computado da mesma forma que na seção 8.3 (Efeitos da Temperatura nas Reações).

Limitação de Nutriente e Substrato: equações de Michaelis-Menten são usadas para representar a limitação de crescimento devido ao nitrogênio inorgânico e fósforo, DBO carbonácea rápida e atenuação pelo oxigênio, sendo que há três formulações para representar a atenuações do oxigênio (O_2 é usado para determinar a atenuação do oxigênio na zona hiporreica). O valor mínimo é então usado para computar o coeficiente de atenuação do nutriente:

$$\phi_{Nh} = \min \left(\frac{n_{a,2} + n_{n,2}}{k_{sNh} + n_{a,2} + n_{n,2}}, \frac{P_{i,2}}{k_{sPh} + P_{i,2}}, \frac{C_{f,2}}{k_{sCh} + C_{f,2}}, F_{oxrh} \right) \quad \text{Equação (A-213)}$$

onde k_{sNh} = constante de meia saturação do nitrogênio [$\mu\text{gN/L}$] e k_{sPh} = constante de meia saturação do fósforo [$\mu\text{gP/L}$], k_{sCh} = constante de meia saturação da DBO carbonácea rápida (mgO_2/L), e F_{oxrh} = fator de atenuação do oxigênio [adimensional entre 0 e 1].

C.2. Limitação por espaço

Se um modelo de crescimento de primeira ordem é usado, um termo deve ser incluído para impor uma limitação de espaço na biomassa do biofilme heterotrófico. Um modelo logístico é usado para esse proposto conforme:

$$\phi_{Sh} = 1 - \frac{a_h}{a_{h,\max}} \quad \text{Equação (A-214)}$$

onde $a_{h,\max}$ = capacidade de suporte sustentável [gD/m³].

C.3. Respiração

A respiração endógena das bactérias heterotróficas é representada como uma taxa de primeira ordem que é atenuada em baixas concentrações de oxigênio:

$$\text{HeteroResp} = F_{oxrh} k_{rh}(T) a_h \quad \text{Equação (A-215)}$$

onde $k_{rh}(T)$ = taxa de respiração das bactérias heterotróficas dependente da temperatura [1/d] e F_{oxrh} = atenuação devida a baixas concentrações de oxigênio [adimensional].

C.4. Morte

A morte das bactérias heterotróficas é representada como uma taxa de primeira ordem:

$$\text{HeteroDeah} = k_{dh}(T) a_h \quad \text{Equação (A-216)}$$

onde $k_{dh}(T)$ = taxa de morte das bactérias heterotróficas dependente da temperatura [1/d].

D. Nitrogênio amoniacal (n_a)

O nitrogênio amoniacal aumenta devido à hidrólise do nitrogênio orgânico e pela respiração do fitoplâncton e das bactérias heterotróficas, sendo perdido por nitrificação e crescimento das bactérias heterotróficas. O saldo líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{na,2}$) é calculado como:

$$S_{na,2} = \text{ONHydr}_2 + r_{na} \text{PhytoResp}_2 - \text{NH4Nitrif}_2 + r_{nd} [\text{HeteroResp} - P_{ah} \text{HeteroGrow}] \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} \quad \text{Equação (A-217)}$$

A taxa de nitrificação da amônia é calculada como:

$$\text{NH4Nitrif}_2 = F_{oxna,2} k_{na}(T) n_{a,2} \quad \text{Equação (A-218)}$$

onde $k_{na}(T)$ = taxa de nitrificação para o nitrogênio amoniacal dependente da temperatura [1/d] e F_{oxna} = atenuação devida a baixas concentrações de oxigênio [adimensional]. A atenuação do oxigênio é modelada com a dependência do oxigênio representada pelo parâmetro K_{sona} .

O coeficiente P_{ah} representa a preferência pela amônia como fonte de nitrogênio para as bactérias heterotróficas:

$$P_{ah} = \frac{n_{a,2} n_{n,2}}{(k_{hnxh} + n_{a,2})(k_{hnxh} + n_{n,2})} + \frac{n_{a,2} k_{hnxh}}{(n_{a,2} + n_{n,2})(k_{hnxh} + n_{n,2})} \quad \text{Equação (A-219)}$$

onde k_{hnxh} = coeficiente de preferência das bactérias heterotróficas pela amônia [mgN/m³].

E. Nitrato (n_n)

O nitrato aumenta pela nitrificação da amônia e é perdido pela desnitrificação e crescimento das bactérias heterotróficas. O saldo líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{nn,2}$) é calculado como:

$$S_{nn,2} = \text{NH4Nitrif}_2 - \text{Denitr}_2 - r_{nd} (1 - P_{ah}) \text{HeteroGrow} \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} \quad \text{Equação (A-220)}$$

A taxa de desnitrificação é computada como:

$$\text{Denitr}_2 = \frac{c_{f,2}}{0,1 + c_{f,2}} (1 - F_{\text{oxdn},2}) k_{\text{dn}}(T) n_{n,2} \quad \text{Equação (A-221)}$$

onde $k_{\text{dn}}(T)$ = taxa de desnitrificação do nitrato dependente da temperatura [1/d] e F_{oxdn} = efeito de baixas concentrações de oxigênio na desnitrificação [adimensional] conforme modelado pela Equação A-112 com a dependência do oxigênio representada pelo parâmetro K_{soxn} .

F. Fósforo inorgânico (p)

O fósforo inorgânico na zona de sedimento hiporreica aumenta devido à hidrólise do fósforo orgânico dissolvido e pela respiração do fitoplâncton e bactérias heterotróficas, sendo subtraído pelo crescimento dessas bactérias. O saldo líquido na zona de sedimento hiporreica ($S_{pi,2}$) é calculado como:

$$S_{pi,2} = \text{OPHydr}_2 + r_{pa} \text{PhytoResp}_2 + r_{pd} [\text{HeteroRep} - \text{HeteroGrow}] \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} \quad \text{Equação (A-222)}$$

G. Oxigênio dissolvido (o)

O oxigênio dissolvido é perdido via oxidação da DBO carbonácea lenta e rápida pelas bactérias em suspensão, crescimento e respiração das bactérias heterotróficas. É também perdido devido à nitrificação, respiração do fitoplâncton e oxidação da demanda química de oxigênio não nitrogenada e não carbonácea (COD). A perda do oxigênio dissolvido da zona de sedimento hiporreica é calculada como:

$$S_{o,2} = -\text{SlowCOxid}_2 - \text{FastCOxid}_2 - [r_{od} \text{HeteroGrow} + r_{od} \text{HeteroResp}] \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} - r_{on} \text{NH4Nitr}_2 - r_{oa} \text{PhytoResp}_2 - \text{CODoxid}_2 \quad \text{Equação (A-223)}$$

H. Carbono Inorgânico Total (c_T)

O carbono inorgânico total aumenta devido à oxidação rápida do carbono pelas bactérias em suspensão e pelo crescimento e respiração das bactérias heterotróficas. É também acrescido devido à respiração do fitoplâncton. O ganho líquido na zona de sedimento hiporreica é calculado como:

$$S_{cT,2} = r_{cco} \text{SlowCOxid}_2 + r_{cco} \text{FastCOxid}_2 + r_{ccd} [\text{HeteroGrow} + \text{HeteroResp}] \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} + r_{cca} \text{PhytoResp}_2 \quad \text{Equação (A-224)}$$

Os coeficientes de estequiometria são derivados da condição quando zona de sedimento hiporreica é desconsiderada (seção 8.5, item R – Carbono Inorgânico Total).

I. Alcalinidade (Alk)

As alterações na alcalinidade na zona hiporreica são devido à respiração do fitoplâncton, crescimento e respiração das bactérias heterotróficas, nitrificação e desnitrificação. O saldo líquido para a zona de sedimento hiporreica ($S_{alk,2}$) é calculado como:

$$S_{alk,2} = r_{alkaa} \text{PhytoResp}_2 + [(-r_{alkda} P_{ah} + r_{alkdn} (1 - P_{ah})) \text{HeteroGrow} + r_{alkda} \text{HeteroResp}] \frac{A_{st,i}}{V_{2,i}} - r_{alkn} \text{NH4Nitr}_2 + r_{alkdn} \text{Denitr}_2 \quad \text{Equação (A-225)}$$

onde os r 's são as relações que traduzem os processos em quantidades correspondentes de alcalinidade. Os coeficientes estequiométricos são derivados da condição quando zona de sedimento hiporreica é desconsiderada (seção 8.5, item S – Alcalinidade).

9.8. Modelo do Fluxo de Nutrientes e Demanda de Oxigênio do Sedimento

Este modelo de fluxo de sedimento é baseado no modelo desenvolvido por Di Toro (2001) apud Pelletier (2008) para calcular fluxos de sedimento e demanda de oxigênio do sedimento como função de matéria orgânica particulada, reações com os sedimentos e as concentrações das

formas solúveis nas camadas superiores da coluna d'água. Com essa possibilidade, o modelo permite o cômputo do fluxo entre o oxigênio e os nutrientes no sedimento baseado no fluxo descendente da matéria orgânica particulada.

A Figura A7 descreve esquematicamente os principais mecanismos do modelo de sedimentos, onde basicamente são divididos em duas camadas: uma fina camada ($\approx 1\text{mm}$) aeróbia acima de uma mais espessa ($\approx 10\text{cm}$) camada anaeróbia. O carbono orgânico, nitrogênio e fósforo nas formas particuladas (fitoplâncton e detritos) são submetidos à gravidade e então depositados nos sedimentos anaeróbios via sedimentação, onde são transformados por reações de mineralização (diagênese) em metano dissolvido, amônia e fósforo inorgânico. Esses constituintes são então transportados para a camada aeróbia onde uma parte do metano e da amônia são oxidados consumindo oxigênio da coluna d'água. O fluxo de oxigênio da água necessário para essas oxidações é a demanda de oxigênio do sedimento (SOD).

Uma vez que o metano tem baixa solubilidade, sua saturação é facilmente excedida e o metano gás é produzido. A liberação de gás metano no ar pode explicar resultados de SOD menores do que esperados em vários sistemas. A SOD é calculada juntamente com os fluxos sedimento-água de carbono, nitrogênio e fósforo que também são gerados no processo (Pelletier *et al*, 2008).

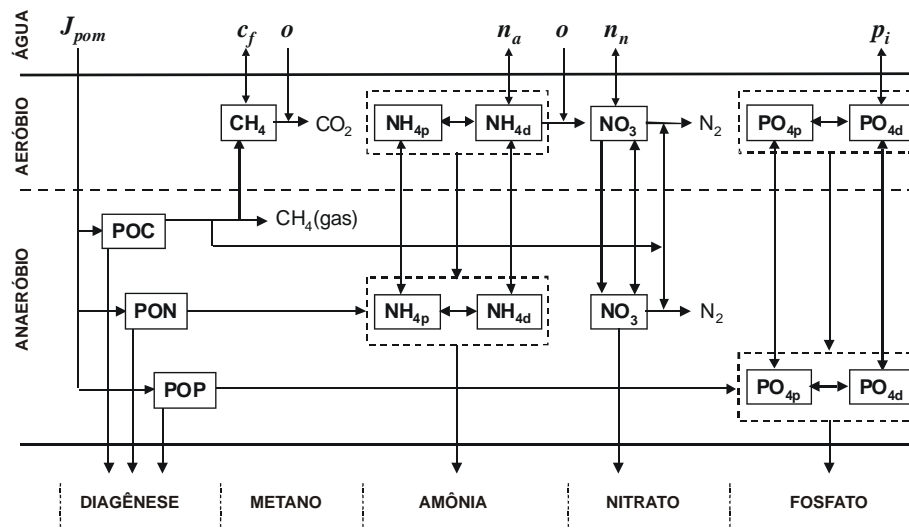


Figura A7 – Ilustração esquemática do modelo DOS (Adaptado de Pelletier *et al*, 2008).

A. Diagênese

Conforme apresentado na Figura A7, o primeiro passo para a modelagem da SOD envolve a determinação do fluxo de matéria orgânica particulada (POM) que é convertido em formas solúveis nos sedimentos anaeróbios. Primeiramente o fluxo total descendente é calculado como a soma dos fluxos de fitoplâncton e sedimentação de detritos da coluna d'água:

$$J_{POM} = r_{da}v_a a_p + v_{dt}m_o \quad \text{Equação (A-226)}$$

onde J_{POM} = fluxo descendente de POM [$\text{gD m}^{-2} \text{d}^{-1}$], r_{da} = a relação entre o peso seco e clorofila a [gD/mgA], v_a = velocidade de sedimentação do fitoplâncton [m/d], a_p = concentração de fitoplâncton [mgA/m^3], v_{dt} = velocidade de sedimentação dos detritos [m/d], e m_o = concentração dos detritos [gD/m^3].

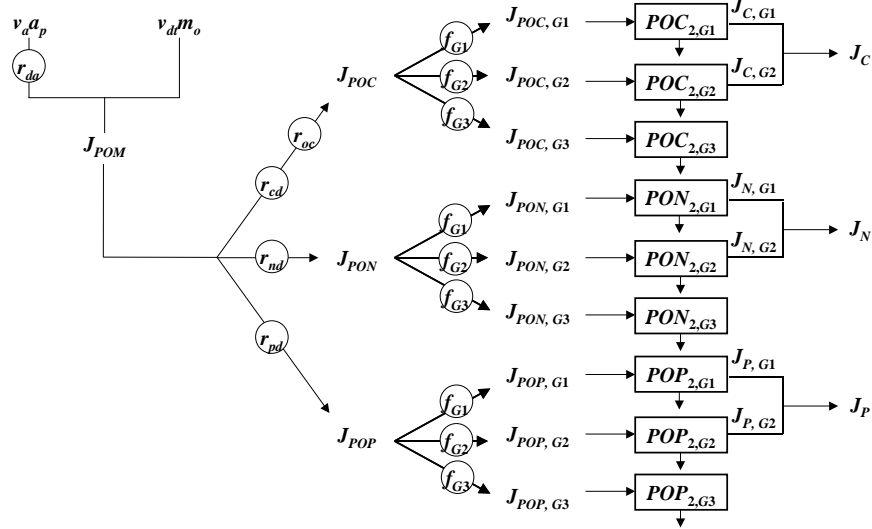


Figura A8 – representação do modo em que a sedimentação de partículas orgânicas (fitoplâncton e detritos) são transformados em fluxos de carbono dissolvido (J_C), nitrogênio (J_N) e fósforo (J_P) nos sedimentos anaeróbios.

As relações estequiométricas são então utilizadas para dividir a POM em carbono, nitrogênio e fósforo. Por conveniência, o modelo expressa o carbono orgânico particulado (POC) como equivalentes de oxigênio usando o coeficiente estequiométrico r_{oc} . Cada um dos fluxos de sedimentos é posteriormente decomposto em três formas reativas: instável (G1), lentamente reativo (G2) e não reativo (G3).

Esses fluxos são então lançados dentro dos balanços de massa para o cômputo da concentração de cada uma das frações na camada anaeróbia. Por exemplo, para o POC instável, o balanço de massa é escrito como:

$$H_2 \frac{dPOC_{2,G1}}{dt} = J_{POC,G1} - k_{POC,G1} \theta_{POC,G1}^{T-20} H_2 POC_{2,G1} - w_2 POC_{2,G1} \quad \text{Equação (A-227)}$$

onde H_2 = espessura da camada anaeróbia [m], $POC_{2,G1}$ = concentração da fração instável do POC na camada anaeróbia [gO_2/m^3], $J_{POC,G1}$ = fluxo do POC instável encaminhado à camada anaeróbia [$gO_2/m^2/d$], $k_{POC,G1}$ = taxa de mineralização do POC instável [d^{-1}], $\theta_{POC,G1}$ = fator de correção de temperatura para a mineralização do POC instável [adimensional], e w_2 = velocidade de decantação [m/d]. Em estado permanente, a Equação A-227 pode ser resolvida para:

$$POC_{2,G1} = \frac{J_{POC,G1}}{k_{POC,G1} \theta_{POC,G1}^{T-20} H_2 + v_b} \quad \text{Equação (A-228)}$$

O fluxo de carbono dissolvido instável, $J_{C,G1}$ [$gO_2/m^2/d$], pode ser calculado como:

$$J_{C,G1} = k_{POC,G1} \theta_{POC,G1}^{T-20} H_2 POC_{2,G1} \quad \text{Equação (A-229)}$$

De maneira similar, um balanço de massa pode ser escrito e resolvido para o carbono orgânico dissolvido lentamente reativo. Esse resultado pode ser adicionado à Equação A-229 para chegar ao fluxo total de carbono dissolvido gerado nos sedimentos anaeróbios:

$$J_C = J_{C,G1} + J_{C,G2} \quad \text{Equação (A-230)}$$

Equações similares são desenvolvidas para computar os fluxos diagenéticos de nitrogênio, J_N [$gN/m^2/d$], e fósforo J_P [$gP/m^2/d$].

B. Amônia

Baseado nos mecanismos delineados na Figura A8, os balanços de massa para a amônia total nas camadas aeróbia e anaeróbia são:

$$H_1 \frac{dNH_{4,1}}{dt} = \omega_{12} (f_{pa2} NH_{4,2} - f_{pa1} NH_{4,1}) + K_{L12} (f_{da2} NH_{4,2} - f_{da1} NH_{4,1}) - w_2 NH_{4,1} + s \left(\frac{n_a}{1000} - f_{da1} NH_{4,1} \right) - \frac{\kappa_{NH4,1}^2}{s} \theta_{NH4}^{T-20} \frac{K_{NH4}}{K_{NH4} + NH_{4,1}} \frac{o}{2K_{NH4,O2} + o} f_{da1} NH_{4,1}$$

Equação (A-231)

$$H_2 \frac{dNH_{4,2}}{dt} = J_N + \omega_{12} (f_{pa1} NH_{4,1} - f_{pa2} NH_{4,2}) + K_{L12} (f_{da1} NH_{4,1} - f_{da2} NH_{4,2}) + w_2 (NH_{4,1} - NH_{4,2})$$

Equação (A-232)

onde H_i = espessura da camada aeróbia [m], $NH_{4,1}$ e $NH_{4,2}$ = concentração da amônia total na camada aeróbia e anaeróbia, respectivamente [gN/m³], n_a = a concentração de amônia nas camadas sobrejacentes da coluna d'água [mgN/m³], $\kappa_{NH4,1}$ = a velocidade da reação de nitrificação nos sedimentos aeróbios [m/d], θ_{NH4} = fator de correção da temperatura para a nitrificação [adimensional], K_{NH4} = constante de meia saturação da amônia [gN/m³], o = concentração de OD nas camadas sobrejacentes [gO₂/m³], e $K_{NH4,O2}$ = constante de meia saturação do oxigênio [mgO₂/L], e J_N = fluxo diagenético de amônia [gN/m²/d].

As frações da amônia na forma dissolvida (f_{dai}) e particulada (f_{pai}) são calculadas como:

$$f_{dai} = \frac{1}{1 + m_i \pi_{ai}}$$

Equação (A-233)

$$f_{pai} = 1 - f_{dai}$$

Equação (A-234)

onde m_i = concentração de sólidos na camada i [gD/m³], e π_{ai} = coeficiente de partição para a amônia na camada i [m³/gD].

O coeficiente de transferência de massa para a mistura das partículas devido à bioturvação (revolvimento e mistura das partículas do sedimento pela fauna ou flora bentônicas) entre as camadas, ω_{12} [m/d], é calculado como:

$$\omega_{12} = \frac{D_p \theta_{Dp}^{T-20}}{H_2} \frac{POC_{2,G1} / r_{oc}}{POC_R} \frac{o}{K_{M,Dp} + o}$$

Equação (A-235)

onde D_p = coeficiente de difusão da bioturvação [m²/d], θ_{Dp} = coeficiente de temperatura [adimensional], POC_R = concentração de referência G1 da bioturvação [gC/m³] e $K_{M,Dp}$ = constante de meia saturação do oxigênio para a bioturvação [gO₂/m³].

O coeficiente de transferência de massa para a difusão da água intersticial entre as camadas, K_{L12} [m/d], é calculado como:

$$K_{L12} = \frac{D_d \theta_{Dd}^{T-20}}{H_2 / 2}$$

Equação (A-236)

onde D_d = coeficiente de difusão da água intersticial [m²/d], e θ_{Dd} = coeficiente de temperatura [adimensional].

O coeficiente de transferência de massa entre a água e os sedimentos aeróbios, s [m/d], é calculado como:

$$s = \frac{SOD}{o}$$

Equação (A-237)

onde SOD = demanda de oxigênio do sedimento [gO₂/m²/d].

Em estado permanente, as Equações A-231 e A-232 são não lineares simultâneas, podendo ser linearizadas assumindo que o termo $NH_{4,1}$ para a nitrificação é constante. As equações lineares simultâneas podem então ser resolvidas para $NH_{4,1}$ e $NH_{4,2}$. Assim, o fluxo de amônia nas camadas de água sobrejacentes pode ser escrito como:

$$J_{NH4} = s \left(f_{da1} NH_{4,1} - \frac{n_a}{1000} \right)$$

Equação (A-238)

C. Nitrato

Os balanços de massa para o nitrato podem ser escritos nas camadas aeróbias e anaeróbias como:

$$H_1 \frac{dNO_{3,1}}{dt} = K_{L12} (NO_{3,2} - NO_{3,1}) - w_2 NO_{3,1} + s \left(\frac{n_n}{1000} - NO_{3,1} \right) + \frac{\kappa_{NH4,1}^2 \theta_{NH4}^{T-20}}{s} \frac{K_{NH4}}{K_{NH4} + NH_{4,1}} \frac{o}{2K_{NH4,O2} + o} f_{da1} NH_{4,1} - \frac{\kappa_{NO3,1}^2 \theta_{NO3}^{T-20}}{s} NO_{3,1} \quad \text{Equação (A-239)}$$

$$H_2 \frac{dNO_{3,2}}{dt} = J_N + K_{L12} (NO_{3,1} - NO_{3,2}) + w_2 (NO_{3,1} - NO_{3,2}) - \kappa_{NO3,2} \theta_{NO3}^{T-20} NO_{3,2} \quad \text{Equação (A-240)}$$

onde $NO_{3,1}$ e $NO_{3,2}$ = concentração do nitrato na camada aeróbia e anaeróbia, respectivamente [gN/m^3], n_n = concentração de nitrato nas camadas sobrejacentes [mgN/m^3], $\kappa_{NO3,1}$ e $\kappa_{NO3,2}$ = velocidades de reação da desnitrificação nas camadas aeróbia e anaeróbia, respectivamente [m/d], e θ_{NO3} = fator de correção de temperatura para a desnitrificação [adimensional].

Da mesma forma que nas Equações A-231 e A-232, as Equações A-239 e A-240 podem ser linearizadas e resolvidas para $NO_{3,1}$ e $NO_{3,2}$. O fluxo de nitrato nas camadas sobrejacentes podem então ser descritas como:

$$J_{NO3} = s \left(NO_{3,1} - \frac{n_n}{1000} \right) \quad \text{Equação (A-241)}$$

A desnitrificação requer uma fonte de carbono representada pela reação química:



O requisito do carbono (expresso em equivalentes de oxigênio por nitrogênio) pode então ser computado como:

$$r_{ondn} = 2,67 \frac{gO_2}{gC} \frac{5 \text{ moleC} \times 12 \text{ gC/moleC}}{4 \text{ moleN} \times 14 \text{ gN/moleN}} \times \frac{1 \text{ gN}}{1000 \text{ mgN}} = 0,00286 \frac{gO_2}{mgN} \quad \text{Equação (A-243)}$$

Assim, os equivalentes de oxigênio consumidos durante a desnitrificação, $J_{O2,dn}$ [$gO_2/m^2/d$], podem ser escritos como:

$$J_{O2,dn} = 1000 \frac{mgN}{gN} \times r_{ondn} \left(\frac{\kappa_{NO3,1}^2 \theta_{NO3}^{T-20}}{s} NO_{3,1} + \kappa_{NO3,2} \theta_{NO3}^{T-20} NO_{3,2} \right) \quad \text{Equação (A-244)}$$

D. Metano

O carbono dissolvido gerado pela diagênese é convertido em metano nos sedimentos anaeróbios. Uma vez que o metano é relativamente insolúvel, a sua saturação pode ser excedida e o gás metano produzido.

Como consequência, ao invés de escrever o balanço de massa para o metano na camada anaeróbia, um modelo analítico desenvolvido por Di Toro *et al* (1990) apud Pelletier (2008), é utilizado para determinar o fluxo em estado permanente de metano dissolvido corrigido pela perda de gás enviada aos sedimentos aeróbios.

Inicialmente o fluxo de carbono da diagênese é corrigido para os equivalentes de oxigênio consumidos durante a desnitrificação:

$$J_{CH4,T} = J_C - J_{O2,dn} \quad \text{Equação (A-245)}$$

onde $J_{CH4,T}$ = fluxo de carbono da diagênese corrigido para a desnitrificação [$gO_2/m^2/d$], em outras palavras. Esse é o fluxo total de produção de metano anaeróbio expresso em equivalentes de oxigênio.

Se $J_{CH4,T}$ é suficientemente grande ($\geq 2K_{L12}C_s$), o gás metano será formado. Nesses casos, o fluxo pode ser corrigido para a perda de gás:

$$J_{CH4,d} = \sqrt{2K_{L12}C_s J_{CH4,T}} \quad \text{Equação (A-246)}$$

onde $J_{CH_4,d}$ = é o fluxo de metano dissolvido (expresso em equivalentes de oxigênio) que é gerado nos sedimentos anaeróbios e enviado aos sedimentos aeróbios [$gO_2/m^2/d$], C_s = concentração de saturação do metano expresso em equivalentes de oxigênio [mgO_2/L]. se $J_{CH_4,T} < 2K_{L12}C_s$, então não há gases formados e:

$$J_{CH_4,d} = J_{CH_4,T} \quad \text{Equação (A-247)}$$

A concentração de saturação do metano é computada como:

$$C_s = 100 \left(1 + \frac{H}{10} \right) 1,024^{20-T} \quad \text{Equação (A-248)}$$

onde H = profundidade da coluna d'água [m] e T = temperatura da água [$^{\circ}C$].

O balanço de massa para o metano na camada aeróbia pode ser escrito como:

$$H_1 \frac{dCH_{4,1}}{dt} = J_{CH_4,d} + s(c_f - CH_{4,1}) - \frac{\kappa_{CH_4,1}^2}{s} \theta_{CH_4}^{T-20} CH_{4,1} \quad \text{Equação (A-249)}$$

onde $CH_{4,1}$ = concentração de metano na camada aeróbia [gO_2/m^3], c_f = DBO carbonácea rápida na camada sobrejacente da coluna d'água [gO_2/m^3], $\kappa_{CH_4,1}$ = velocidade da reação da oxidação do metano nos sedimentos aeróbios [m/d], e θ_{CH_4} = fator de correção da temperatura [adimensional]. Em estado permanente, esse balanço pode ser resolvido para:

$$CH_{4,1} = \frac{J_{CH_4,d} + sc_f}{s + \frac{\kappa_{CH_4,1}^2}{s} \theta_{CH_4}^{T-20}} \quad \text{Equação (A-250)}$$

O fluxo de metano nas camadas sobrejacentes, J_{CH_4} [$gO_2/m^2/d$], pode então ser escrito como:

$$J_{CH_4} = s(CH_{4,1} - c_f) \quad \text{Equação (A-251)}$$

E. SOD

A SOD [$gO_2/m^2/d$] é igual à soma do oxigênio consumido na oxidação do metano e nitrificação:

$$SOD = CSOD + NSOD \quad \text{Equação (A-252)}$$

onde $CSOD$ = é a demanda de oxigênio gerada pela oxidação do metano [$gO_2/m^2/d$] e $NSOD$ = é a demanda de oxigênio gerada pela nitrificação [$gO_2/m^2/d$]. Estas demandas são computadas como:

$$CSOD = \frac{\kappa_{CH_4,1}^2}{s} \theta_{CH_4}^{T-20} CH_{4,1} \quad \text{Equação (A-253)}$$

$$NSOD = r_{on} \frac{\kappa_{NH_4,1}^2}{s} \theta_{NH_4}^{T-20} \frac{K_{NH_4}}{K_{NH_4} + NH_{4,1}} \frac{o}{2K_{NH_4,O_2} + o} f_{dal} NH_{4,1} \quad \text{Equação (A-254)}$$

onde r_{on} = relação entre o oxigênio e nitrogênio durante a nitrificação [= 4,57 gO_2/gN].

F. Fósforo Inorgânico

Os seguintes balanços de massa são usados para representar o fósforo inorgânico na camada aeróbia e anaeróbia:

$$H_1 \frac{dPO_{4,1}}{dt} = \omega_{12} (f_{pp2} PO_{4,2} - f_{pp1} PO_{4,1}) + K_{L12} (f_{dp2} PO_{4,2} - f_{dp1} PO_{4,1}) - w_2 PO_{4,1} + s \left(\frac{P_i}{1000} - f_{dal} PO_{4,1} \right) \quad \text{Equação (A-255)}$$

$$H_2 \frac{dPO_{4,2}}{dt} = J_P + \omega_{12} (f_{pp1} PO_{4,1} - f_{pp2} PO_{4,2}) + K_{L12} (f_{dp1} PO_{4,1} - f_{dp2} PO_{4,2}) + w_2 (PO_{4,1} - PO_{4,2})$$

Equação (A-256)

onde $PO_{4,1}$ e $PO_{4,2}$ = concentração do fósforo inorgânico total na camada aeróbia e anaeróbia, respectivamente [gP/m^3], p_i = fósforo inorgânico nas camadas sobrejacentes [mgP/m^3], e J_P = fluxo diagenético de fósforo [$gP/m^2/d$].

As frações do fósforo na forma dissolvida (f_{dpi}) e particulada (f_{ppi}) são computadas como:

$$f_{dpi} = \frac{1}{1 + m_i \pi_{pi}}$$

Equação (A-257)

$$f_{ppi} = 1 - f_{dpi}$$

Equação (A-258)

onde π_{pi} = coeficiente de particionamento do fósforo inorgânico na camada i [m^3/gD].

O coeficiente de particionamento na camada anaeróbia é programado como um valor de entrada no modelo. Para a camada aeróbia, se a concentração de oxigênio na camada de água sobrejacente exceder a concentração crítica, o_{crit} [gO_2/m^3], então o coeficiente de particionamento é aumentado para representar a absorção do fósforo sobre os oxihidróxidos de ferro conforme a equação:

$$\pi_{p1} = \pi_{p2} (\Delta \pi_{PO4,1})$$

Equação (A-259)

onde $\Delta \pi_{PO4,1}$ é um fator que aumenta o coeficiente de particionamento da camada aeróbia em relação à camada anaeróbia;

Se a concentração de oxigênio cai abaixo de o_{crit} então o coeficiente de particionamento é decrescido suavemente até que ele atinja a camada anaeróbia em um valor que produza oxigênio zero:

$$\pi_{p1} = \pi_{p2} (\Delta \pi_{PO4,1})^{o/o_{crit}}$$

Equação (A-260)

As Equações A-255 e A-256 podem ser resolvidas para $PO_{4,1}$ e $PO_{4,2}$. O fluxo do fósforo para as camadas sobrejacentes é computado como:

$$J_{PO4} = s \left(PO_{4,1} - \frac{p_i}{1000} \right)$$

Equação (A-261)

G. Esquema de solução

Embora a sequência de Equações apresentadas e utilizadas para o cálculo da SOD, uma solução simples não produzirá resultados corretos uma vez que elas são interdependentes. Como exemplo, o coeficiente de transferência de massa na superfície depende da SOD. A SOD por sua vez depende da concentração da amônia e do metano que também são calculados via balanço de massa e dependem do s . Assim, a técnica iterativa utilizada no QUAL2Kw realiza as seguintes operações:

- i. Determinam-se os fluxos diagenéticos: J_C , J_N e J_P ;
- ii. Inicia-se com uma estimativa inicial de SOD:

$$SOD_{init} = J_C + r'_{on} J_N$$

Equação (A-262)

onde r'_{on} = relação de oxigênio para nitrogênio consumido na conversão total da amônia para gás nitrogênio via nitrificação/desnitrificação [$= 1,714 gO_2/gN$]. Essa relação contabiliza o carbono utilizado para a desnitrificação.

- iii. Computa-se s usando:

$$s = \frac{SOD_{init}}{o}$$

Equação (A-263)

- iv. Resolve-se a SOD para a amônia, nitrato e metano e computa a $CSOD$ e a $NSOD$;
- v. Realiza-se uma revisão da estimativa da SOD usando uma média ponderada:

$$SOD = \frac{SOD_{init} + CSOD + NSOD}{2} \quad \text{Equação (A-264)}$$

vi. Verifica-se a convergência através do cálculo do erro relativo aproximado:

$$\varepsilon_a = \left| \frac{SOD - SOD_{init}}{SOD} \right| \times 100\% \quad \text{Equação (A-265)}$$

- vii. Se ε_a é maior que o critério de para prescrito ε_s então programa-se $SOD_{nit} = SOD$ e retorna-se para o passo ii;
- viii. Se a convergência é adequada ($\varepsilon_a \leq \varepsilon_s$), então se computa as concentrações de fósforo inorgânico;
- ix. Computam-se os fluxos de amônia, nitrato, metano e fosfato.

10. ANEXO B – COEFICIENTES OBTIDOS NA CALIBRAÇÃO

	MARÉ BAIXA	MARÉ MÉDIA	MARÉ ALTA		
Parameter	Value	Value	Value	Units	Symbol
Stoichiometry:					
Carbon	49.5857	49.43438	49.6871	gC	gC
Nitrogen	3.141954	3.398118	8.044272	gN	gN
Phosphorus	0.5938416	1.114448	0.6865472	gP	gP
Dry weight	100	100	100	gD	gD
Chlorophyll	0.8397744	0.5630848	1.2418528	gA	gA
Inorganic suspended solids:					
Settling velocity	0.994348	0.360258	0.461704	m/d	v_i
Oxygen:					
Reaeration model	Internal	Internal	Internal		
Temp correction	1.024	1.024	1.024		\square_a
Reaeration wind effect	None	None	None		
O2 for carbon oxidation	2.69	2.69	2.69	gO ₂ /gC	r_{oc}
O2 for NH4 nitrification	4.57	4.57	4.57	gO ₂ /gN	r_{on}
Oxygen inhib model CBOD oxidation	Exponential	Exponential	Exponential		
Oxygen inhib parameter CBOD oxidation	0.60	0.60	0.60	L/mgO ₂	K_{soef}
Oxygen inhib model nitrification	Exponential	Exponential	Exponential		
Oxygen inhib parameter nitrification	0.60	0.60	0.60	L/mgO ₂	K_{sona}
Oxygen enhance model denitrification	Exponential	Exponential	Exponential		
Oxygen enhance parameter denitrification	0.60	0.60	0.60	L/mgO ₂	K_{sodn}
Oxygen inhib model phyto resp	Exponential	Exponential	Exponential		
Oxygen inhib parameter phyto resp	0.60	0.60	0.60	L/mgO ₂	K_{sop}
Oxygen enhance model bot alg resp	Exponential	Exponential	Exponential		
Oxygen enhance parameter bot alg resp	0.60	0.60	0.60	L/mgO ₂	K_{sob}
Slow CBOD:					
Hydrolysis rate	4.715415	4.98224	4.55144	/d	k_{hc}
Temp correction	1.047	1.047	1.047		\square_{hc}
Oxidation rate	0.259045	0.97818	0.47331	/d	k_{dcs}
Temp correction	1.047	1.047	1.047		\square_{dcs}
Fast CBOD:					
Oxidation rate	0.012985	0.10608	0.232505	/d	k_{dc}
Temp correction	1.047	1.047	1.047		\square_{dc}
Organic N:					
Hydrolysis	0.082125	0.013945	0.070025	/d	k_{hn}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		\square_{hn}
Settling velocity	0.05731	0.207816	0.018094	m/d	v_{on}
Ammonium:					
Nitrification			25	/d	\square_{na}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		\square_{na}
Nitrate:					
Denitrification	1.372674	0.7875	0.369016	/d	k_{dn}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		\square_{dn}
Sed denitrification transfer coeff	0.705548	0.715666	0.993332	m/d	v_{di}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		\square_{di}
Organic P:					
Hydrolysis	3.761915	1.56831	1.069405	/d	k_{hp}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		\square_{hp}
Settling velocity	0.236704	0.453524	1.983336	m/d	v_{op}
Inorganic P:					
Settling velocity	0.721818	0.965	0.048544	m/d	v_{ip}
Sed P oxygen attenuation half sat constant	1.551228	0.264314	1.648086	mgO ₂ /L	K_{spi}
Phytoplankton:					
Max Growth rate	2.0163255	2.938272	2.2462035	/d	k_{gp}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		\square_{gp}
Respiration rate	0.097137	0.532872	0.224098	/d	k_{rp}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		\square_{rp}
Death rate	0.666358	0.578067	0.02726	/d	k_{dp}
Temp correction	1.0199949	1.02917677	1.03340463		\square_{dp}
Nitrogen half sat constant	81.79875	97.77045	110.93355	ugN/L	K_{sPP}
Phosphorus half sat constant	30.2178	8.9747	26.17295	ugP/L	K_{sNP}
Inorganic carbon half sat constant	9.93E-05	5.01E-05	4.85E-05	moles/L	K_{sCP}

Phytoplankton use HCO3- as substrate	Yes	Yes	Yes		
Light model	Half saturation	Half saturation	Half saturation		
Light constant	66.3194592	67.4430912	53.269776	langleys/d	K_{LP}
Ammonia preference	25	25	25	ugN/L	k_{HNXP}
Settling velocity	0.05619	1.021865	0.715485	m/d	V_a
Bottom Plants:					
Growth model	Zero-order	Zero-order	Zero-order		
Max Growth rate	57.1131	61.739	69.2542	gD/m ² /d or /d	C_{gb}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		<input type="checkbox"/> gb
First-order model carrying capacity	150.97835	195.7496	162.37715	gD/m ²	$a_{b,max}$
Basal respiration rate	0.0631266	0.0361617	0.0674433	/d	k_{r1b}
Photo-respiration rate parameter	0.4211826	0.1985982	0.233205	unitless	k_{r2b}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		<input type="checkbox"/> rb
Excretion rate	0.4511695	0.2243255	0.4916155	/d	k_{eb}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		<input type="checkbox"/> db
Death rate	0.2161935	0.27253	0.244446	/d	k_{db}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		<input type="checkbox"/> db
External nitrogen half sat constant	279.1743	39.5301	171.7785	ugN/L	k_{sPb}
External phosphorus half sat constant	33.6872	81.2955	92.4909	ugP/L	k_{sN_b}
Inorganic carbon half sat constant	1.16E-04	6.41E-05	9.52E-05	moles/L	k_{sCb}
Bottom algae use HCO3- as substrate	Yes	Yes	Yes		
Light model	Half saturation	Half saturation	Half saturation		
Light constant	19.206694	93.23038	77.741731	langleys/d	K_{Lb}
Ammonia preference	16.989589	28.000963	11.127205	ugN/L	k_{HNxb}
Subsistence quota for nitrogen	7.154318592	69.20854625	14.91168146	mgN/gD	q_{0N}
Subsistence quota for phosphorus	5.40551908	4.52163385	4.92980527	mgP/gD	q_{0P}
Maximum uptake rate for nitrogen	1313.8173	699.05605	758.02805	mgN/gD/d	<input type="checkbox"/> mN
Maximum uptake rate for phosphorus	158.03645	162.40055	156.75155	mgP/gD/d	<input type="checkbox"/> mP
Internal nitrogen half sat ratio	1.7812161	2.4258956	2.97844135		$K_{qN,ratio}$
Internal phosphorus half sat ratio	1.2704495	4.13233905	2.1197311		$K_{qP,ratio}$
Nitrogen uptake water column fraction	0.582631	0.40115	0.740606		$N_{UpWCfrac}$
Phosphorus uptake water column fraction	0.554385	0.606083	0.651602		$P_{UpWCfrac}$
Detritus (POM):					
Dissolution rate	4.57986	4.93856	3.94436	/d	k_{dt}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		<input type="checkbox"/> dt
Settling velocity	2.707215	3.21859	2.908685	m/d	V_{dt}
Pathogens:					
Decay rate	0.1088112	0.3370648	0.5563752	/d	k_{dx}
Temp correction	1.07	1.07	1.07		<input type="checkbox"/> dx
Settling velocity	0.125148	0.677183	0.377743	m/d	V_x
alpha constant for light mortality	0.560387	0.54512	0.008855	/d per ly/hr	$apath$
pH:					
Partial pressure of carbon dioxide	347	347	347	ppm	p_{CO2}
Hyporheic metabolism					
Model for biofilm oxidation of fast CBOD	Zero-order	Zero-order	Zero-order		level 1
Max biofilm growth rate	0.19134	0.41326	0.74282	gO2/m ² /d or /d	"
Temp correction	1.047	1.047	1.047		"
Fast CBOD half-saturation	0.010288	0.875394	0.494478	mgO2/L	"
Oxygen inhib model	Exponential	Exponential	Exponential		"
Oxygen inhib parameter	0.60	0.60	0.60	L/mgO2	"
Respiration rate	0.0593264	0.1965254	0.0571614	/d	level 2
Temp correction	1.07	1.07	1.07		"
Death rate	0.05	0.05	0.05	/d	"
Temp correction	1.07	1.07	1.07		"
External nitrogen half sat constant	15	15	15	ugN/L	"
External phosphorus half sat constant	1.660354	0.681544	1.766362	ugP/L	"
Ammonia preference	2.760075	4.352275	12.430975	ugN/L	"
First-order model carrying capacity	49.9244	6.9166	79.6066	gD/m ²	"
Generic constituent					
Decay rate	0.8	0.8	0.8	/d	
Temp correction	1.07	1.07	1.07		<input type="checkbox"/>
Settling velocity	1	1	1	m/d	
Use generic constituent as COD?	No	No	No		

