

**Simulação do lançamento de esgotos domésticos em rios usando um modelo de
qualidade d'água, SisBAHIA®**

Por

Alfredo Estevão de Barros Leite

Dissertação de Mestrado apresentada ao programa de pós-graduação em Saúde Pública da Escola Nacional de Saúde Pública, Fiocruz, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Saúde Pública. Área de concentração: Saneamento Ambiental.

Orientadores: Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha
Odir Clécio da Cruz Roque

DSSA/ENSP/FIOCRUZ

Rio de Janeiro

Junho de 2004

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, seres abnegados, que sempre me deram exemplos cotidianos do valor da educação.

À Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha, em quem confiei nas minhas necessárias mudanças de rumo, compreendendo os remansos e turbulências do caminho.

Ao Odir Clécio da Cruz Roque, pela colaboração.

Ao Teófilo Monteiro, meu primeiro orientador nesta jornada.

Aos professores Dalton Silva e Julio Fortes pelos incentivos e orientações concedidos ao longo da carreira acadêmica

À eterna galera dos tempos do basquete no Colégio Pedro II: Anderson, Ci, David, Guedes e Maurício, com quem me formei no colégio e na vida.

Ao grupo que Soma: Aline, Bella, Cecília, Cris, Flavia, João, Juan, Paula, Ruy e Vivian. Juntos nos melhores e nos piores momentos.

Aos colegas do mestrado: Alexandre Lioi, Beatriz, Rafaela, Páulea e Sergio, que enfrentaram ou estão enfrentando o mesmo sacrifício.

Aos colegas do IBAMA que me deram o apoio necessário para a realização deste trabalho.

Resumo da dissertação apresentada à ENSP/FIOCRUZ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de mestre

Simulação do lançamento de esgotos domésticos em rios usando um modelo de qualidade d'água, SisBAHIA®

A depleção do oxigênio nos corpos hídricos, decorrente da degradação da matéria orgânica presente em esgotos domésticos, representa um efeito negativo de enorme importância, especialmente para a manutenção da vida nestes ambientes. Seus processos de transformações físicas, químicas e biológicas podem ser analisados com apoio de modelos matemáticos, sendo fundamental integrá-los também ao transporte das substâncias e à circulação hidrodinâmica do corpo d'água, para avaliar a distribuição espacial e temporal de substâncias em diversas condições. Assim, a possibilidade de aplicações dos modelos computacionais para desenvolvimento científico e como apoio aos instrumentos de políticas de meio ambiente e de recursos hídricos é extensa. O modelo de qualidade d'água aqui utilizado, o SisBAHIA®, tem sido usado em corpos d'água naturais e encontra-se em constante processo de aperfeiçoamento, dada a complexidade dos processos e as variáveis que o compõem. Neste estudo, é dada ênfase aos processos de transformação envolvendo os ciclos do oxigênio e do nitrogênio em meios aquáticos. São feitas simulações em um canal unidimensional com velocidade constante, com lançamento constante de DBO (Demanda Bioquímica de Oxigênio) e nitrogênio amônia, variando a profundidade do canal, alguns parâmetros e coeficientes que interferem nestes processos. Foram encontrados valores de concentração coerentes com o que é citado na literatura, verificando que a reaeração e a deposição de sedimentos são os processos mais significativos na remoção da matéria orgânica na coluna d'água. No entanto, foram observados alguns ajustes a serem feitos na cinética das reações com compostos nitrogenados, que apresentam variações mais lentas que a matéria carbonácea.

PALAVRAS CHAVE: Modelo de Qualidade d'água, Esgotos domésticos, Ciclo do Nitrogênio, Ciclo do Oxigênio

Abstract of dissertation presented to ENSP/FIOCRUZ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master's Degree in Science (M.Sc.)

Simulation of domestic wastewater discharge in rivers using a water quality model, SisBAHIA®

Oxygen depletion in water bodies caused by the degradation of organic matter present in wastewater represents a negative effect of huge significance, especially for life maintenance in these environments. Its physical, chemical and biological processes are analyzed by mathematical models, which also couple mass transport and hydrodynamics, in order to evaluate spatial and temporal distribution of substances. Therefore, there are broad possibilities of computational models applications for scientific development and as a support for environment and water resources policies instruments. The water quality model used here, the SisBAHIA®, has been tested in several real cases and is constantly being improved, given the complexity of the processes and variables set. In this study, emphasis is given to transformation processes associated to oxygen and nitrogen cycles in water environment. Simulations are carried out in a one-dimensional canal, with constant velocity and constant input of BOD and ammonia loads, while canal depth, some parameters and some coefficients are varied. Some results showed agreement with those from review. They also revealed that reaeration and sediment deposition are the most significant processes for BOD decay in water column. However, reaction kinetics of nitrogen compounds must be adjusted, since they have a slower variation than carbon organic matter.

KEY WORDS: Water Quality Model, Domestic Wastewater, Nitrogen Cycle, Oxygen Cycle

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	1
2 OBJETIVOS.....	9
3 MODELOS DE QUALIDADE DE ÁGUA.....	10
3.1 O PROCESSO DE MODELAGEM.....	11
3.2 OUTROS MODELOS DE QUALIDADE D'ÁGUA PARA RIOS.....	15
3.2.1 QUAL2E / USEPA.....	15
3.2.2 MIKE-11 / DHI.....	16
4 SISBAHIA®.....	19
4.1 HIDRODINÂMICA.....	21
4.2 TRANSPORTE DE MASSA.....	22
5 INDICADORES DE QUALIDADE D'ÁGUA.....	25
5.1 OXIGÊNIO DISSOLVIDO(OD).....	26
5.1.1 Balanço de Oxigênio.....	28
5.1.2 Consumo de Oxigênio.....	30
5.1.3 Introdução de Oxigênio.....	34
5.2 DEMANDA BIOQUÍMICA DE OXIGÊNIO (DBO).....	40
5.3 NUTRIENTES.....	46
5.3.1 Nitrogênio.....	48
5.3.2 Fósforo (P).....	52
6 CINÉTICA DE REAÇÕES.....	56
6.1 INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA.....	61
6.2 EQUAÇÕES DO MODELO DE QUALIDADE D'ÁGUA.....	61
7 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	64
7.1 ASPECTOS GERAIS DAS SIMULAÇÕES.....	64
7.2 CASO ANALÍTICO.....	65
7.3 CENÁRIOS SIMULADOS.....	67
7.3.1 Zonas de autodepuração.....	70
7.3.2 Processo de nitrificação.....	71
7.3.3 Influência da Temperatura.....	74
7.3.4 Sedimentação de matéria orgânica.....	74
7.3.5 Processo de Reaeração.....	77
8 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	79
9 BIBLIOGRAFIA.....	81

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1: FLUXOGRAMA DO PROCESSO DE MODELAGEM (FONTE: ROSMAN, 2001)...	12
FIGURA 2: PROCESSOS ENVOLVENDO OXIGÊNIO NO MODELO (CUNHA, 2001).....	30
FIGURA 3: VARIÇÃO DIÁRIA DE OD, DEVIDA À FOTOSÍNTESE POR PLANTAS AQUÁTICAS (THOMANN&MULLER, 1987).....	36
FIGURA 4: REDUÇÃO DA DBO DE ESGOTO FRESCO, SEGUNDO THERIAULT (IMHOFF, 1985).....	42
FIGURA 5: PROGRESSÃO TEMPORAL DO CRESCIMENTO BACTERIANO (VON SPERLING, 1996B), SENDO: 1) FASE DE RETARDO; 2) FASE DE CRESCIMENTO LOGARÍTMICO; 3) FASE ESTACIONÁRIA; 4) FASE DE MORTE LOGARÍTMICA	44
FIGURA 6: REAÇÃO DE ORDEM ZERO: VARIÇÃO DA TAXA DC/DT COM O TEMPO E VARIÇÃO DA CONCENTRAÇÃO COM O TEMPO (VON SPERLING, 1996B).....	57
FIGURA 7: REAÇÃO DE PRIMEIRA ORDEM: VARIÇÃO DA TAXA DC/DT COM O TEMPO E VARIÇÃO DA CONCENTRAÇÃO COM O TEMPO (VON SPERLING, 1996B)....	58
FIGURA 8: CINÉTICA DE MICHAELIS-MENTEN. DUAS CONDIÇÕES EXTREMAS NA REAÇÃO DE SATURAÇÃO.....	59
FIGURA 9: COMPARAÇÃO ENTRE SOLUÇÃO ANALÍTICA E SOLUÇÃO NUMÉRICA OBTIDA DO MODELO.....	66
FIGURA 10: VARIÇÕES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO, OD, AMÔNIA E NITRATO E DELIMITAÇÃO DAS ZONAS DE AUTODEPURAÇÃO, SENDO: 1) ZONA DE DEGRADAÇÃO; 2) ZONA DE DECOMPOSIÇÃO ATIVA; 3) ZONA DE RECUPERAÇÃO; 4) ZONA DE ÁGUAS LIMPAS.....	70
FIGURA 11: NITRIFICAÇÃO AO LONGO DA EXTENSÃO DO CANAL, PARA OS TEMPOS DE SIMULAÇÃO DE 1, 2 E 4 DIAS.....	72
FIGURA 12: CONCENTRAÇÕES DE OD, PARA TEMPOS DE SIMULAÇÃO DE 1 DIA E 4 DIAS, COM E SEM OS COMPOSTOS NITROGENADOS.....	73
FIGURA 13: CONCENTRAÇÕES DE OD E DBO AO LONGO DO CANAL, PARA 20°C E 30°C, APÓS 1 DIA DE SIMULAÇÃO.....	74
FIGURA 14: CONCENTRAÇÕES DE OD E DBO AO LONGO DO CANAL, PARA DIFERENTES VELOCIDADES DE DEPOSIÇÃO DE SUBSTÂNCIA ORGÂNICA, APÓS 6 HORAS DE SIMULAÇÃO.....	76
FIGURA 15: CONCENTRAÇÕES DE OD E DBO PARA PROFUNDIDADES DE 4M E 20M E SEUS COEFICIENTES DE REAERAÇÃO, DE 0,255 D-1 E 0,023 D-1, RESPECTIVAMENTE... 	77

ÍNDICE DE TABELAS

TABELA 1: CONDIÇÕES PARA A VIDA AQUÁTICA	27
TABELA 2: VALORES DO COEFICIENTE KA SEGUNDO MODELOS BASEADOS EM DADOS HIDRÁULICOS (BASE E, 20°C).....	37
TABELA 3: VALORES TÍPICOS DE KA (BASE E, 20°C).....	39
TABELA 4: VALORES TÍPICOS DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO E FÓSFORO EM ESGOTOS DOMÉSTICOS.....	47
TABELA 5: ESTADO DE EUTROFIZAÇÃO DE LAGOS EM FUNÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE FÓSFORO	47
TABELA 6: DISTRIBUIÇÃO DE COMPOSTOS AMONIACAIS EM FUNÇÃO DO PH	50
TABELA 7: CONDIÇÕES INICIAIS PARA TODA A EXTENSÃO DO CANAL.....	67
TABELA 8: CONDIÇÕES DE CONTORNO NA FRONTEIRA DE TERRA DE MONTANTE, CONSTANTES AO LONGO DO TEMPO.....	68
TABELA 9: PARÂMETROS USADOS NA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO LANÇAMENTO DE EFLUENTE DE ESGOTO DOMÉSTICO EM UM RIO.....	69
FIGURA 15: CONCENTRAÇÕES DE OD E DBO PARA PROFUNDIDADES DE 4M E 20M E SEUS COEFICIENTES DE REAERAÇÃO, DE 0,255 D-1 E 0,023 D-1, RESPECTIVAMENTE...77	

1 Introdução

A poluição de corpos hídricos superficiais é um dos maiores problemas ambientais em todo o mundo, causando efeitos negativos para a saúde ambiental e prejudicando a manutenção das condições básicas de qualidade d'água para seus diversos usos. Este tipo de poluição tem origem principalmente no lançamento de esgotos domésticos e industriais, assim como pode ser causada por detritos do solo que são incorporados à água durante escoamento superficial e por infiltrações naturais de mananciais subjacentes a solos contaminados. Como consequência destes lançamentos, podem ocorrer problemas de saúde na população, causados por ingestão de alimentos provenientes das águas contaminadas e pelo contato direto com esta água, que pode veicular agentes nocivos químicos ou biológicos.

A produção de dejetos é inerente à própria existência humana, sendo observada em maior volume em grandes centros urbanos, dado que estas regiões sofreram grande elevação da concentração demográfica, acompanhada do aumento da industrialização, e, em muitos casos, mesmo atualmente ainda não são assistidas por um planejamento urbano e de infra-estrutura. A implementação de intervenções estruturais para prevenir os problemas ambientais, como o tratamento de efluentes anterior ao descarte e melhorias nos sistemas coletores, ainda está defasada em relação à evolução do conhecimento nesta área. As ações em saneamento ambiental dependem basicamente de políticas públicas, que tradicionalmente ignoram sua importância, priorizando obras de maior visibilidade e apelo popular.

Até mesmo as cidades mais abastadas, que sempre contaram com certa infra-estrutura de saneamento, já estão sujeitas a racionamento no abastecimento de água, causado pela degradação dos mananciais de onde é feita a captação da água. O déficit em quantidade de água chega a dificultar até o seu uso prioritário, que é o consumo humano, por não atender aos requisitos mínimos de qualidade para se submeter ao tratamento. Dois casos de grande notoriedade são o da cidade de São Paulo, que já sofre com o racionamento, e o da região metropolitana do Rio de Janeiro, que está prestes a enfrentar o mesmo problema. Desta forma, a carência de saneamento é sentida por toda a população, até em locais que eram considerados mais distantes deste problema.

A poluição hídrica de maior representatividade em volume e carga é de natureza orgânica, principalmente por estar associada à composição dos esgotos domésticos. Este problema já está contornado em países mais desenvolvidos, mas ainda constitui o principal impacto de qualidade ambiental no Brasil, que conta com infra-estrutura precária de coleta e tratamento de esgotos domésticos em todo o território nacional. Durante o processo de estabilização da matéria orgânica presente na água do corpo receptor, ocorre o consumo de oxigênio dissolvido através do metabolismo dos microrganismos decompositores, levando muitas vezes à depleção deste elemento essencial para a vida aquática em geral.

Na falta de oxigênio, a matéria orgânica presente no corpo d'água pode ser degradada por anaerobiose, processo pelo qual os seres decompositores usam outros elementos que não o oxigênio como aceptores de elétrons na obtenção de energia para seu metabolismo. Este processo, entretanto, necessita de maior período de tempo para os microrganismos completarem a estabilização da matéria orgânica, além de gerar como subprodutos gases que causam odores desagradáveis. Apenas um número muito restrito de seres vivos conseguem viver em um corpo hídrico em estado anaeróbio, sendo considerado um meio ambiente morto. Por estas razões, é desejável evitar que a estabilização da matéria orgânica no curso d'água aconteça por meio de processos anaeróbios, sendo tolerado apenas em campos próximos a descartes de efluentes e na região próxima aos sedimentos de fundo. Por outro lado, os processos anaeróbios são bastante utilizados para tratamento de esgotos domésticos devido à facilidade de operação destas estações e baixo custo com energia.

A ausência de oxigênio em um corpo hídrico pode levar a conclusões erradas quanto à composição do poluente causador do dano, como foi o caso do desastre provocado pela indústria Cataguazes de Papel, que afetou o rio Paraíba do Sul em março de 2003. Ao causar grande mortandade de peixes, foi amplamente propalado que a lixívia proveniente da barragem rompida continha componentes tóxicos, pela possibilidade de a substância ter provocado efeitos diretos na biota fluvial, mas, de fato, o efeito foi indireto. Por mais estranho que seja, os peixes morreram afogados, o que também se observa com alguma frequência na lagoa Rodrigo de Freitas. A lignina, principal componente do líquido vazado, embora seja encontrada na natureza sofre uma biodegradação muito mais lenta do que os esgotos domésticos. O grande volume derramado superou a capacidade de assimilação do rio, consumindo todo o oxigênio

necessário para a manutenção da vida de organismos superiores. Esta velocidade de transformação dos compostos tem grande importância na avaliação da capacidade de um rio se regenerar, porém o efluente a ser avaliado será sempre o esgoto doméstico, que sofre uma degradação bem mais rápida.

Outros graves casos de poluição hídrica no mundo motivaram programas de revitalização e despoluição de corpos hídricos de grande importância. Mas acima de tudo, os impactos ambientais negativos relativos a esta poluição reforçaram a necessidade de criar normas, instrumentos de controle e incentivos para evitar o problema na sua origem. Com este propósito, surgiram leis estaduais para o controle e manutenção da qualidade ambiental, culminando com a publicação de uma norma federal: a Resolução Nº 20 do Conselho Nacional do Meio Ambiente (Resolução CONAMA 20), de 18 de junho de 1986, que estabelece limites de concentração de alguns parâmetros físico-químicos para o lançamento de cargas poluidoras em corpos hídricos e para a classificação dos corpos hídricos de acordo com os seus usos preponderantes. Esta resolução contemplou os estados que ainda necessitavam de normas neste sentido, além de servir como base para os padrões dos Órgãos Estaduais de Meio Ambiente já existentes ou a serem criados, que não podem ser menos restritivos do que aqueles presentes na resolução.

Para estipular estes níveis de qualidade foram considerados, entre outros aspectos, as necessidades da comunidade, a saúde e o bem estar humano, e o equilíbrio ecológico aquático para a compatibilização dos diversos usos. A estipulação de padrões de qualidade ambiental é um dos instrumentos da Política Nacional do Meio Ambiente – PNMA - regida pela Lei Federal Nº 6.938, de 31 de agosto de 1981.

O uso de modelos ambientais no suporte à gestão ambiental vem de encontro a uma das considerações iniciais presentes no texto da Resolução CONAMA 20: “a necessidade de se criar instrumentos para avaliar a evolução da qualidade das águas, em relação aos níveis estabelecidos no enquadramento, de forma a facilitar a fixação e controle de metas visando atingir gradativamente os objetivos permanentes”. Contudo, na época da publicação da Resolução os modelos computacionais ambientais apresentavam limitações em vários aspectos, que iam do conhecimento dos processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem na natureza e suas soluções matemáticas até a capacidade tecnológica e dificuldade de manuseio dos sistemas dos computadores que

simulavam os cenários. Hoje, estas limitações foram superadas e os modelos estão cada vez mais precisos, sendo o conhecimento das variáveis ambientais a serem inseridas na simulação o maior desafio para o aperfeiçoamento, o que demanda dados pretéritos na maioria das vezes insuficientes ou mesmo inexistentes, com exceção para locais de maior importância econômica e/ou ambiental.

Os modelos ambientais vêm sendo cada vez mais usados como suporte a outros instrumentos da PNMA, como o zoneamento ambiental e o licenciamento ambiental de atividades poluidoras, impactantes ou que utilizam recursos minerais. Embora não exista por lei a obrigação de se fazer este prognóstico para cada licenciamento de empreendimento a ser implantado, esta avaliação pode ser exigida através do termo de referência emitido pelo órgão ambiental, se a atividade for sujeita a um estudo prévio de impacto ambiental (EIA).

A deterioração ambiental crescente, aliada à escassez da água para seus usos múltiplos, aponta para a implantação da gestão integrada dos recursos hídricos com o objetivo de equacionar os conflitos decorrentes, estabelecendo o planejamento e zoneamento de uso do solo de acordo com os impactos inerentes a cada atividade. Um empreendimento com alto potencial de degradação hídrica deve atender a padrões muito mais restritos de lançamento quando está numa área usada para captação de água para tratamento e abastecimento ou para recreação de contato primário, por exemplo. Assim, se o impacto de alguma atividade atinge níveis que inviabilizam as soluções técnicas para atender os critérios exigidos para certa região, deve ser selecionado um outro local para sua implantação que tenha grau de exigência menor.

Na gestão de recursos hídricos, já estão sendo implementados valores diferenciados em função da qualidade da água ofertada ao usuário, a fim de forçar o controle de poluição através de instrumentos econômicos. Usuários que captam água e a devolvem para o rio sem tratamento pagam taxas maiores do que os que lançam esta água nos padrões recomendados. Algumas indústrias já estão contestando a cobrança pelo uso da água, argumentando que não se pode cobrar por um produto que não tem sua qualidade controlada ao ser fornecido para o consumidor. Neste sentido, os modelos de qualidade de água podem ser empregados como apoio à outorga dos direitos de uso dos recursos hídricos – um dos instrumentos que compõem a Política Nacional dos Recursos Hídricos, instituída pela Lei Federal 9.433/97 – estimando aproximadamente se as

características do bem entregue atende minimamente às necessidades do usuário, bem como estipular valores em função do efluente lançado pelo “poluidor”, outro tipo de usuário também sujeito à outorga. Com apoio do monitoramento constante do corpo hídrico e sua bacia hidrográfica, pode-se fazer ajustes cada vez mais precisos do modelo, atingindo excelentes níveis de confiabilidade para as previsões de qualidade e para o suporte à cobrança.

Os padrões de lançamento existentes ainda se mostram ineficazes para alguns corpos hídricos como baías, lagos, estuários e até mesmo trechos de rios que possuem baixo padrão de circulação hidrodinâmica e, portanto, muitas vezes não possuem capacidade de transporte e diluição suficientes para mitigar o impacto do lançamento de águas residuárias. Isto leva ao acúmulo de cargas poluidoras que afetam as comunidades aquáticas diretamente, através de substâncias tóxicas, ou indiretamente, alterando condições físico-químicas mínimas necessárias para as funções vitais dos seres vivos, como é o caso da depleção de oxigênio dissolvido. Assim, com base nas avaliações realizadas pelos modelos ambientais, podem ser determinados padrões mais rigorosos para empreendimentos próximos a ecossistemas frágeis ou ambientes que se encontram no limite de sua capacidade de suporte.

A solução adotada para o despejo de esgoto doméstico é o lançamento, na maioria das vezes sem tratamento prévio dos efluentes no corpo d'água. Se o lançamento se faz em corpos d'água com bom poder de depuração, como por exemplo baías e áreas costeiras, os riscos à saúde da população que utiliza estes recursos são pequenos; caso contrário, a possibilidade de exposição das populações à água contaminada é muito grande. Hoje, as ações sobre o meio ambiente devem ser observadas em uma escala global, e não mais numa ótica local. A poluição de um rio devido ao lançamento de efluentes não ficará restrita ao trecho do rio onde ocorre o lançamento, mas comprometerá toda a bacia hidrográfica deste rio, bem como a região estuarina onde este rio lança suas águas (CUNHA *et al*, 2003).

Desta forma, ao se avaliar a distribuição temporal e espacial dos escalares, ou seja, substâncias ou propriedades físicas da água, é fundamental considerar os padrões de corrente do corpo hídrico. Com o conhecimento da circulação hidrodinâmica de determinada região pode-se buscar os melhores pontos para se fazer o lançamento de cargas poluidoras através de emissários. A identificação de trechos nos corpos d'água

com velocidades mais intensas, correntes e canais de fluxo preferencial pode ser empregada com o objetivo de fazer o descarte de efluentes, aproveitando seus potenciais de transporte, diluição e reaeração. Da mesma forma, distribuições espaciais e temporais de substâncias devem ser conhecidas para o monitoramento de cenários mais críticos, geralmente em pontos com circulação menos intensa e em épocas de seca, quando os rios apresentam baixas vazões.

O conhecimento dos processos de decaimento e de transporte de substâncias envolvidos na recuperação natural dos rios despertou o interesse de pesquisadores desde as primeiras décadas do século passado, tendo o estudo de Streeter-Phelps de 1925 como referência pioneira. O modelo desenvolvido associava a cinética dos processos de degradação da matéria orgânica, suas fontes e sumidouros de oxigênio no meio aquático, e a hidrodinâmica, considerando a circulação unidimensional do rio, com base em determinações empíricas bastante simplificadas, que para serem generalizadas apresentavam grande número de restrições. Neste modelo se considerava apenas o transporte advectivo, para um escoamento permanente e uniforme, como um fluxo em pistão.

Ao longo do tempo, o entendimento dos diversos processos físicos, químicos e biológicos e suas inter-relações, que não tinham solução conhecida e portanto eram transformados em parâmetros fixos para cada simulação, evoluiu, sendo conhecida sua formulação matemática. Grande parte das equações formuladas são resolvíveis apenas através de métodos numéricos, envolvendo uma enorme quantidade de cálculos que demandariam um esforço humano grandioso para processá-los, não fosse o avanço da capacidade dos computadores. Isto permite, ainda, automatizar a integração de variados modelos, que abordam desde processos dinâmicos e de transporte até reações químicas e biológicas, ocorrendo simultaneamente e possibilitando a obtenção de respostas mais próximas da realidade.

No caso de alguns corpos hídricos é possível simplificar a distribuição espacial de substâncias, considerando as suas concentrações homogêneas ao longo da coluna d'água em cada ponto, avaliando esta dispersão em duas dimensões (em planta), como é a configuração espacial apresentada no sistema computacional utilizado nesta dissertação, o Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental, referido no decorrer do trabalho pela sigla SisBAHIA®. O SisBAHIA® é composto de um modelo de circulação hidrodinâmica

para corpos d'água rasos e com densidade constante, modelos de transporte de contaminantes euleriano e lagrangeano e o modelo de qualidade d'água, que inclui ainda as reações de transformação. No SisBAHIA®, os contaminantes são sempre considerados passivos, ou seja, não interferem na hidrodinâmica, e são reativos, o que significa que são passíveis de sofrer transformações químicas e biológicas no ambiente.

Estas transformações que compõem o modelo de qualidade d'água merecem atenção especial neste trabalho, principalmente os vários mecanismos naturais que influem na disponibilidade de oxigênio no meio aquático, tanto para o seu consumo quanto para sua produção. Com relação ao seu consumo em um sistema natural, o principal fator de desequilíbrio é a introdução excessiva de matéria orgânica através do lançamento de efluentes, ou mesmo a produção excessiva de biomassa causada por grande disponibilidade de nutrientes, a eutrofização, que é sucedida pelo decaimento dos organismos vivos quando o oxigênio passa a limitar este crescimento. A produção de oxigênio acontece no interior do meio aquático, através da fotossíntese de vegetais, que liberam este elemento durante a fixação do carbono. O aumento da concentração de oxigênio dissolvido na água também pode se dar pela transferência para a superfície livre da água de elementos oriundos do ar atmosférico ou pela contribuição da água proveniente de rios afluentes em melhor estado de preservação e com temperaturas inferiores.

Dentre os compostos que são estabilizados biologicamente, uma parcela significativa é de nitrogenados, que consomem quase um quarto do oxigênio total para a degradação da matéria orgânica (USEPA, 1975). O nitrogênio é um nutriente essencial para a composição de animais e vegetais, e o modelo de qualidade d'água aqui utilizado considera o ciclo deste elemento no ambiente e suas implicações no balanço de oxigênio. Neste estudo, os processos naturais que integram o ciclo dos elementos estão inseridos nas suas equações de balanço, ressaltando que aqui o interesse está limitado àqueles processos que acontecem no meio aquático.

Outro importante macronutriente, o fósforo, é estudado visando identificar sua relevância na definição da qualidade dos corpos d'água. Embora o modelo ainda não contemple este elemento, impossibilitando considera-lo nas simulações, são apontados alguns fenômenos em que o fósforo pode influenciar, como a autodepuração e a eutrofização. Sendo assim, é feita uma revisão bibliográfica das formas como o fósforo

se apresenta no esgoto com vistas a uma futura implementação no modelo deste elemento e dos processos de transformação a que está sujeito.

A dissertação não pretende detalhar os processos hidrodinâmicos e de transporte de massa das substâncias, que vêm sendo continuamente aperfeiçoados pelos pesquisadores que desenvolvem o modelo aqui utilizado. Contudo, tendo em vista que eles são utilizados de forma integrada com o modelo de qualidade d'água, são descritos apenas os aspectos principais, bem como são destacadas as principais vantagens do SisBAHIA® em relação a outros modelos computacionais, particularmente o que se refere à filtragem espacial e temporal.

2 Objetivos

O objetivo principal desta dissertação é estudar, através da comparação de simulações para diferentes cenários, a sensibilidade do modelo à variação dos coeficientes relacionados com as reações cinéticas, e, assim, definir quais as variáveis de estado e os processos componentes do modelo de qualidade d'água do SisBAHIA® que têm maior importância. Assim, para diversos parâmetros de modelagem e coeficientes associados às reações cinéticas, o modelo produzirá resultados que são avaliados em relação aos valores e padrões encontrados na revisão bibliográfica, indicando os potenciais ajustes a serem feitos no modelo de qualidade d'água do SisBAHIA®.

Ainda, como objetivos específicos podem ser citados:

- Levantamento bibliográfico da importância ambiental dos compostos fosforados presentes no esgoto, o que será incorporado ao SisBAHIA®, a exemplo de outros modelos de qualidade d'água
- Comparar resultados do modelo para reaeração e deposição de matéria orgânica para diferentes profundidades de canal e variando coeficientes, a fim de definir a representatividade destes processos.
- Identificar a relevância dos compostos nitrogenados dentro do consumo de oxigênio e verificar se a cinética de transformação resultante das simulações realizadas com estes compostos correspondem ao que é descrito na literatura.

3 Modelos de Qualidade de Água

Os modelos de qualidade de água são cada vez mais usados para estimar as variações temporais e espaciais de indicadores físicos, químicos ou biológicos. As principais aplicações desses modelos acontecem na avaliação da dispersão de poluentes para prognósticos em estudos de impacto ambiental, gestão de recursos hídricos e simulação de acidentes, como vazamentos e ruptura de tanques e barragens. Dentro da gestão e planejamento ambiental, os modelos podem dar suporte a comparações de variadas intervenções feitas no ambiente, não apenas de atividades diretamente poluidoras mas também de obras civis, que afetam características físicas, observando como o meio aquático será afetado nas suas características gerais, e até que ponto isso restringirá o seu uso para outras finalidades. As cargas poluidoras lançadas nos corpos receptores podem ser simuladas para diversas condições, avaliando a efetividade de estratégias de controle de poluição mais rigorosas, aliadas a limites de lançamento mais restritivos. Desta forma, é possível avaliar tanto a implantação de novas atividades industriais quanto o desenvolvimento urbano em geral, inclusive o crescimento populacional em novas áreas.

Ao se fazer uma campanha de monitoramento ambiental em um corpo hídrico deve-se definir os pontos onde serão medidos os indicadores de qualidade. Para tanto, além de ser necessário o conhecimento das potenciais atividades poluidoras, é fundamental o conhecimento da hidrodinâmica do sistema, uma vez que a água atuará como veículo destas substâncias. Neste sentido, o modelo pode auxiliar a seleção de locais para se instalar sondas e coletar amostras, evitando trechos que sofram interferências de um rio afluente ou da descarga de uma indústria, por exemplo.

Uma das vantagens da aplicação do modelo é ter uma resposta rápida do comportamento do sistema para diversas condições e variáveis, e, a partir disso, poder desenvolver projetos com base nas situações previstas pelo modelo. Exemplos destas aplicações são a escolha da localização do ponto de descarga e o dimensionamento de dispersores de um emissário submarino, bem como a melhoria de projetos de estruturas hidráulicas. No entanto, existem modelos com estas finalidades específicas, e o modelo usado aqui não é o mais adequado para fazer estes tipos de simulações. Para estes casos, em que ocorrem conflitos entre as escalas de discretização do modelo hidrodinâmico e

as escalas de plumas ou manchas contaminantes, é mais adequado o uso de modelos lagrangeanos.

Estes modelos são de grande valia para a seleção de alternativas de ações corretivas, com o intuito de avaliar que efeito terá no futuro uma determinada ação realizada no presente. Programas de despoluição que incluem a implantação de medidas estruturais, como estações de tratamento de esgoto e implantação de tubulações interceptoras, ou mesmo medidas não-estruturais, como dragagem, podem ter sua eficiência global na recuperação do corpo d'água avaliada através da simulação destes cenários.

3.1 O processo de modelagem

O fluxograma apresentado na Figura 1 representa o processo da modelagem, sendo o relatório final o item mais importante em estudos, projetos ou gestão ambiental, pois é o que contém as informações que integram e auxiliam o processo de tomada de decisões (ROSMAN, 2001). Para maior compreensão do fluxograma, seguem alguns conceitos adaptados de ROSMAN, 2001, citados em AMARAL, 2003:

- **Observação e ciclo de medição**

Inicialmente as observações de um dado fenômeno são geralmente qualitativas, a fim de propiciar um entendimento das causas, efeitos e agentes intervenientes. Em uma segunda etapa, parte-se para observações quantitativas, fazendo-se medições das grandezas das causas, efeitos e agentes intervenientes inferidos na etapa de observação qualitativa. A partir das observações e medições desenvolvem-se modelos conceptuais dos fenômenos de interesse.

- **Modelo conceptual**

A modelagem conceptual corresponde a formar na mente a concepção do fenômeno observado, conhecer suas causas e efeitos, compreender as interações e relevância dos agentes intervenientes na sua ocorrência. Como indica o diagrama, a partir do modelo conceptual existem duas rotas. A mais comum é a tradução para um modelo matemático, mas por vezes o entendimento não é suficiente para isso, neste caso recorre-se diretamente a um modelo físico.

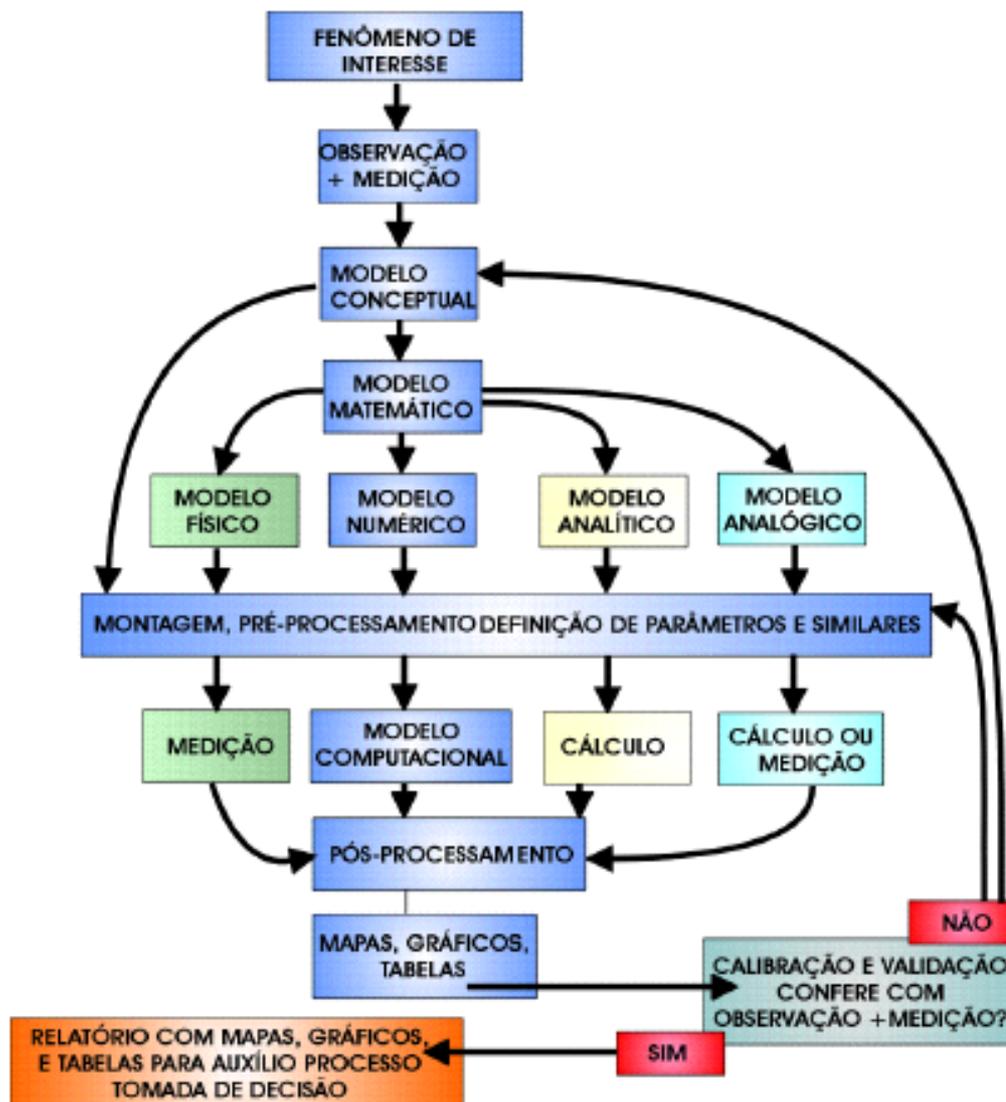


Figura 1: Fluxograma do processo de modelagem (Fonte: ROSMAN, 2001)

- Modelo matemático

A modelagem matemática consiste na tradução para a linguagem matemática do modelo conceptual do fenômeno de interesse. Quanto melhor e mais completo o modelo conceptual, mais complexo é o modelo matemático e conseqüentemente maior é a dificuldade para se obter uma solução geral. Por esta razão, o modelo matemático é a grande encruzilhada do processo de modelagem, pois dependendo da possibilidade de resolvê-lo, quatro rotas são possíveis, levando respectivamente aos modelos físico, numérico, analítico e analógico.

- Modelo analítico

Utilizado quando se tem soluções gerais. No entanto, na maioria das situações práticas em recursos hídricos, não há uma solução geral conhecida. Neste caso, resta recorrer aos modelos físicos e aos modelos numéricos.

- Modelo analógico

O modelo analógico é utilizado somente em situações muito peculiares e em geral de cunho mais acadêmico do que prático. Um exemplo de aplicação deste tipo de modelo é uma analogia entre o fluxo das correntes elétricas e o fluxo das correntes hidráulicas, que permite desenvolver alguns modelos de circuito hidráulico em analogia a modelos de circuitos elétricos.

- Modelo físico

Em geral, são modelos que reproduzem em escala reduzida, modelos conceituais de fenômenos de interesse, chamados de protótipos. Através de um modelo matemático de semelhança, definem-se as escalas de semelhança entre o protótipo e o modelo físico reduzido. Tal necessidade está indicada no diagrama pela rota ligando o modelo matemático ao modelo físico.

À medida que foram surgindo computadores com maior capacidade de processamento e de armazenamento, os modelos físicos foram sendo substituídos por modelos numéricos e a tendência continua.

Atualmente utilizam-se modelos físicos somente em casos muito especiais, pois envolvem enorme patrimônio imobiliário, enormes gastos em equipamentos eletromecânicos, alto consumo de energia, e grande número de técnicos especializados, sendo incomparavelmente mais lentos e custosos do que os modelos numéricos. Porém, enquanto houver fenômenos de interesse mal compreendidos, haverá modelos conceituais empíricos ou semi-empíricos e, conseqüentemente, modelos matemáticos falhos. Nestes casos, embora seja possível fazer modelos numéricos, estes terão em si as falhas do modelo matemático e a alternativa dos modelos físicos permanecerá necessária e muito importante. Tal fato é indicado no diagrama pela rota que liga diretamente o modelo conceitual ao modelo físico.

Outro ponto importante dos modelos físicos é a facilidade de compreensão do fenômeno pelos mais leigos, o que atualmente vem sendo substituído pelas animações computacionais feitas a partir de modelos numéricos.

- Modelo numérico

Os modelos numéricos são traduções dos modelos matemáticos adaptados para diferentes métodos de cálculo, por exemplo, diferenças finitas, elementos de contorno, elementos finitos e volumes finitos. Praticamente qualquer modelo matemático pode ser resolvido através de um modelo numérico, e em geral há relativamente pouca perda de informação na tradução de um para o outro. Os modelos numéricos permitem a solução de uma gama de problemas muitíssimo mais abrangente que qualquer outra modalidade de modelos.

- Montagem, pré-processamento, definição de parâmetros e similares:

Trata-se de uma etapa comum a qualquer tipo de modelo para obter informações quantitativas do modelo conceptual e do modelo matemático. Antes de obter tais informações será necessário preparar o modelo e organizar os dados de entrada. Para modelos físicos, por exemplo, essa obtenção das informações quantitativas é feita através de medição direta com equipamentos específicos; já para os modelos numéricos, os resultados quantitativos são obtidos via modelo computacional, que consiste na tradução de um modelo numérico para uma linguagem computacional.

- Pós-processamento

Esta etapa é também comum a todos os modelos e consiste na tradução da massa de informações quantitativas obtidas na saída dos modelos, de forma que possam ser mais facilmente assimiladas.

- Calibração e Validação

Nesta etapa verifica-se se os resultados obtidos conferem com o que se observa a respeito do fenômeno de interesse. Existem duas possibilidades:

A validação NÃO confere com as observações/medições: neste caso o modelo não está validado e entra-se no processo de calibração efetivamente, com duas rotas possíveis, representadas no diagrama da Figura 1. A rota mais comum é a curta, que leva à caixa do pré-processamento, o que corresponde ao procedimento usual de calibração via ajustes de montagem e de parâmetros, acertos de dados de entrada e coeficientes em qualquer tipo de modelo. A menos comum é a rota circular longa levando novamente para o modelo conceptual, que deve ser seguida apenas no caso de repetidos insucessos de validação do modelo com a rota curta, havendo então a necessidade de verificar se não há erro de concepção.

A validação confere com as observações/medições: neste caso o modelo já está validado e o processo de modelagem termina na efetiva incorporação dos resultados do modelo ao acervo de informações a serem consideradas no processo de tomada de decisão.

- Relatório para auxílio no processo de tomada de decisões

É o objetivo final do processo de modelagem, ou seja, produzir informações organizadas para auxiliar um processo de tomada de decisões.

ROSMAN (2001) também enfatiza que o entendimento e bom uso das informações pelo modelador depende do conhecimento por parte deste, do fenômeno de interesse. Modelos conceituais dos fenômenos de interesse são fundamentais ao modelador, para que este possa fazer pleno uso das informações apresentadas, julgando a qualidade das informações recebidas e rejeitando-as, se necessário.

3.2 Outros Modelos de qualidade d'água para rios

Visando situar o SisBAHIA® dentro de um contexto mundial, neste item são apresentados os dois modelos de qualidade d'água usados em rios com maior número de referências na literatura. Estes modelos são bastante utilizados tanto por agências ambientais, para gestão e planejamento ambiental, quanto pelo meio acadêmico, para pesquisa e desenvolvimento científico. Os modelos são unidimensionais (1D) e se baseiam no transporte advectivo-difusivo euleriano, permitindo reações de transformação de compostos.

3.2.1 QUAL2E / USEPA

O modelo QUAL2E foi desenvolvido por BROWN e BARNWELL (1987) para a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (USEPA, *United States Environmental Protection Agency*). O modelo e o seu manual estão disponíveis para serem obtidos gratuitamente na página da EPA na Internet. O programa é de fácil manuseio, o que explica a sua popularidade como ferramenta de apoio ao gerenciamento da qualidade d'água e o grande número de artigos científicos com o seu uso. Recentemente, o modelo foi incorporado a outros modelos da USEPA como o

HSPF e WASP5 em um ambiente SIG (Sistema de Informações Geográficas), compondo um sistema de programas chamado BASINS (COX, 2003).

O modelo QUAL2E é unidimensional, considerando o escoamento permanente. Desta forma, o modelo assume que os solutos são completamente misturados através da seção transversal, o transporte advectivo ocorre com o fluxo médio e o transporte dispersivo é proporcional ao gradiente de concentração (lei de Fick), sendo esta a principal restrição do modelo, pois os coeficientes de difusão são constantes, não tendo relação com o campo de velocidades (BROWN & BARNWEL, 1987)

Quanto às reações cinéticas que acontecem no modelo QUAL2E, elas incluem a degradação do material orgânico, o crescimento das algas (quantificadas pela clorofila), a nitrificação, a hidrólise do fósforo e nitrogênio orgânico (de algas), a reaeração, a sedimentação das algas e compostos orgânicos de nitrogênio e fósforo, a demanda de oxigênio do sedimento, a liberação do nitrogênio e fósforo do sedimento. Todos estes processos consideram o efeito dos ciclos do nitrogênio e do fósforo no balanço de oxigênio. A maior parte das reações acontece como decaimento de primeira ordem.

A grande vantagem do QUAL2E é a possibilidade de introdução das variações temporais para os parâmetros. Como estes parâmetros raramente são medidos nas situações de simulação, o conhecimento da variação temporal é impossível, ficando a sua utilização difícil de ser realizada para situações reais. Vale lembrar que este modelo só deve ser aplicado a rios ou estuários longos e estreitos, que possam ser modelados a partir de modelos unidimensionais (CUNHA *et al*, 2003).

3.2.2 MIKE-11 / DHI

O modelo MIKE-11 foi desenvolvido pelo Instituto de Hidráulica Dinamarquês (DHI, *Danish Hydraulics Institute*) e constitui uma parte de um conjunto de programas bastante comercializados na Europa. A versão demo MIKE11 2003b pode ser obtida no site do programa na Internet, porém o modelo exige uma memória para armazenamento no computador muito maior do que os outros programas. O módulo principal do sistema é o modelo hidrodinâmico, que simula a dinâmica do movimento d'água em rios ou canais. Os módulos que podem ser adicionados incluem os que simulam a advecção-dispersão, qualidade d'água, transporte de sedimentos, eutrofização e chuva-escoamento

superficial. O MIKE11 é bastante utilizado por profissionais da Agência Ambiental da Inglaterra e Gales (EA, Environment Agency) que trabalham com prevenção de enchentes, sendo também usado como modelo de qualidade d'água como parte da metodologia do Gerenciamento de Poluição Urbana, onde é empregado para avaliar o impacto de descartes intermitentes em rios e estuários. O MIKE11 é capaz de modelar tanto seções do rio sujeitas a maré quanto aplicações somente para água doce, por funcionar com o suporte de um modelo hidrodinâmico completo (COX, 2003).

O MIKE11 é unidimensional e permite a simulação de fluxos dinâmicos em redes ramificadas e em circuitos fechados. Embora o seu esquema considere as condições de fluxo homogêneas dentro do canal, ele possibilita a simulação de fluxo sobre estruturas como represas. O transporte de solutos é simulado por um módulo de advecção-dispersão que resolve a mesma equação 1D de conservação de massa que o QUAL2E, mas o MIKE11 a executa através de uma solução dinâmica. Desta forma, o modelo conceitual também se baseia nos segmentos em série, mas neste caso o fluxo é modelado explicitamente usando as equações hidrodinâmicas completas e as equações de advecção-difusão (em inglês ADE, *advection-diffusion equation*) são resolvidas dinamicamente (COX, 2003).

O módulo de advecção-dispersão pode simular decaimentos de primeira ordem dos constituintes, mas para simulações mais avançadas pode-se usar o módulo de qualidade d'água. No MIKE11, a qualidade d'água pode ser simulada em qualquer um dos seis diferentes níveis de complexidade. Para a modelagem de OD, os crescentes níveis de complexidade podem ser resumidos como segue:

- Nível 1 – Decaimento de primeira ordem para DBO e OD mais efeitos de reaeração e temperatura.
- Nível 2 – Como o anterior, mais trocas de DBO dos sedimentos (sedimentação e ressuspensão, por exemplo).
- Nível 3 – Como o anterior, mais balanço de amônia e nitrato sem desnitrificação. Este processo acrescenta demanda de oxigênio devida à nitrificação.
- Nível 4 – Como o anterior, mais desnitrificação.
- Nível 5 – Como o anterior, mais uma demanda “atrasada” de oxigênio devida à DBO dos sedimentos.
- Nível 6 – Como o anterior, mais amônia e nitrato.

Processos coesivos e não coesivos também podem ser incluídos para DBO. Processos envolvendo fósforo e coliformes podem ser acrescentados a qualquer um dos níveis. Outros módulos de qualidade d'água incluem: eutrofização, metais pesados, oxidação de ferro, transporte de nutrientes e *wetlands* (n.a.: pode-se aplicar tanto para pântanos naturais quanto para o sistema de tratamento de efluentes com este nome). Em cada caso o modelo pode ser aplicado com ou sem os processos envolvendo os sedimentos.

4 **SisBAHIA®**

Neste capítulo é apresentado o SisBAHIA® e os modelos que servem como base para o modelo de qualidade d'água, que são o modelo hidrodinâmico e os modelos de transporte. É apresentada uma descrição sucinta de cada modelo, suficiente para a compreensão de como funciona o sistema.

Os modelos utilizados nesta dissertação fazem parte do Sistema de Base Hidrodinâmica Ambiental, denominado SisBAHIA®, desenvolvido pela Área de Engenharia Costeira e Oceanográfica do Programa de Engenharia Oceânica da COPPE/UFRJ. O SisBAHIA® é capaz de realizar modelagem ambiental de corpos d'água costeiros e é constituído por um modelo de circulação hidrodinâmica para corpos d'água rasos (2DH e 3D), um modelo de transporte euleriano advectivo-difusivo, um modelo de transporte lagrangeano advectivo-difusivo e um modelo de qualidade d'água. Aqui serão apresentados os conceitos básicos para a compreensão do modelo hidrodinâmico e de transporte de massa euleriano e lagrangeano, abordados conjuntamente. Para maior aprofundamento teórico e conceitual da modelagem, deve-se consultar ROSMAN (1997), ROSMAN (2000) e ROSMAN (2001). Para informações gerais sobre o SisBAHIA® pode-se consultar a página <http://www.peno.coppe.ufrj.br/sisbahia> . Em geral os modelos para previsão do movimento das águas (quantidade) são denominados “modelos hidrodinâmicos”, por sua vez, os modelos de transporte de escalares (qualidade) são comumente chamados de “modelos de dispersão” (ROSMAN, 2001).

O SisBAHIA® utiliza elementos finitos na discretização espacial e diferenças finitas na discretização temporal. Atenção especial deve ser dada à técnica numérica utilizada e à discretização das tensões turbulentas, parametrizadas segundo técnicas de filtragem derivadas da técnica conhecida como Simulação de Grandes Vórtices (LES, Large Eddy Simulation). Maiores detalhes em ALDAMA,1985 e ROSMAN,1987, citados em CUNHA *et al*, 2003 (2002).

Uma das vantagens do modelo de qualidade d'água do SisBAHIA® é a parametrização do termo referente ao transporte difusivo, não considerando os coeficientes de difusão constantes. O uso desta parametrização permite uma facilidade na calibração, já que uma parte dos termos difusivos é calculada pelo modelo, a partir do campo de

velocidades. Outra vantagem é o esquema numérico adotado. O modelo utiliza o método dos elementos finitos na discretização espacial e o método das diferenças finitas na discretização temporal. Deste modo, o controle das oscilações numéricas é melhor realizado, não precisando de correções para os termos referentes ao transporte advectivo, como é feito no MIKE11. Observe-se que tais termos de correções são na verdade termos difusivos ou dissipativos, adicionados ao modelo com o objetivo de remover oscilações numéricas geradas nos cálculos. (CUNHA *et al*, 2002)

O modelo de qualidade de água do SisBAHIA® considera os ciclos do oxigênio e do nitrogênio. Como as reações cinéticas modeladas variam fortemente com a temperatura e salinidade (SELLERS, 1965), o modelo foi construído considerando os seguintes parâmetros: Salinidade, Temperatura, Oxigênio Dissolvido, Demanda Bioquímica de Oxigênio, Nitrogênio na forma de Amônia, Nitrogênio na forma de Nitrato e Biomassa. As reações envolvendo DBO-OD, Nitrogênio-Nitrato e Nitrogênio-Amônia são descritas com mais profundidade no Capítulo 5.

A integração na direção vertical sugere que este modelo deve ser aplicado em corpos d'água rasos que possuem dimensões horizontais preponderantes sobre a dimensão vertical, com a coluna d'água bem misturada, onde a estratificação vertical é pouco relevante. Neste tipo de corpo receptor, o campo de velocidades usado é adotado como homogêneo na vertical, não permitindo a descrição do perfil de velocidades (CUNHA *et al*, 2003, 2002)

O modelo 2DH pode representar bem a pluma de dispersão em um rio - mesmo sendo promediado na vertical - visto que não apresenta camadas de estratificação e tem perfil hidrodinâmico vertical definido segundo padrões consagrados, o que implica um bom ajuste no transporte advectivo-difusivo. Tome-se, por exemplo, o caso bastante comum do lançamento efetuado em uma margem de um canal de efluente que tenha densidade igual à da água do meio que o recebe. Se este lançamento for pontual, o poluente espalha-se de forma tridimensional, pelo menos na região próxima ao lançamento. À medida que o poluente desloca-se para jusante e passa a ocupar uma região no espaço cada vez maior, o fenômeno tende a tornar-se bidimensional, ocorrendo uma uniformização de concentração ao longo da direção vertical (FISCHER *et al*, 1979)

4.1 Hidrodinâmica

O SisBAHIA® contém os modelos hidrodinâmicos FIST (sigla para “*Filtered In Space and Time*” ou Filtrado no Espaço e no Tempo). O sistema de modelagem de corpos d’água com superfície livre FIST3D é uma série de modelos hidrodinâmicos, nos quais a modelagem da turbulência é baseada em técnicas semelhantes às empregadas na Simulação de Grandes Vórtices (LES). A versão 3D do FIST, com densidade constante, resolve as equações de Navier-Stokes com aproximações para águas rasas, i.e., considerando a aproximação de pressão hidrostática. O FIST3D utiliza uma técnica numérica em dois módulos, calculando, primeiramente, os valores da elevação da superfície livre e, em seguida, o campo de velocidades. Dependendo da opção do usuário, os resultados podem ser 3D, 2DH, ou ambos (ROSMAN, 2000).

O sistema de modelagem FIST3D permite que os dados de vento sejam variáveis no tempo e no espaço. Para o módulo 2DH, o coeficiente de atrito no fundo é variável no tempo e espaço e depende da amplitude da rugosidade equivalente de fundo. Para o módulo 3D, geralmente especifica-se velocidade nula no fundo como condição de contorno (ROSMAN, 2000).

O sistema FIST3D tem sido testado em várias situações práticas e tem gerado resultados bastante acurados. Geralmente, é necessária apenas uma calibragem mínima, devido ao fato do modelo ter uma modelagem auto-ajustável para a turbulência na escala sub-malha, e coeficientes dinamicamente variáveis para as tensões de vento e de atrito no fundo. Alguns resultados são apresentados em ROSMAN (2000).

Os módulos do programa hidrodinâmico FIST3D, integrantes do SisBAHIA®, foram aplicados de modo a reproduzir experimentos de laboratório. Em todos os casos analisados, os resultados dos modelos apresentaram uma concordância muito boa com os dados coletados nas medições de campo. O módulo 2DH do FIST3D foi comparado com o reconhecido sistema de modelagem MIKE21 do Danish Hydraulic Institute - DHI, através da simulação de um canal experimental com escoamento não permanente com separação e recirculação. O modelo FIST3D apresentou consistentemente uma melhor concordância com os dados experimentais do que o modelo MIKE21. A simulação de escoamento não permanente com separação em um canal experimental é um bom teste para o modelo de turbulência adotado no SisBAHIA®, e

conseqüentemente, para a capacidade do modelo em simular escoamentos complexos. O modelo FIST3D foi validado em todos estes testes (ROSMAN, 2000)

4.2 Transporte de massa

Considerando a natureza e as possíveis fontes dos escalares de interesse, torna-se evidente que uma vasta gama de escalas de problemas pode surgir. Se, por exemplo, quer-se investigar o transporte de um escalar ao longo de um corpo d'água, como o transporte de sal em uma baía, a escala de interesse deverá possivelmente compreender toda a área do corpo d'água, e ser resolvida a partir de modelos de transporte do tipo euleriano. No entanto, se o interesse reside na pluma de um emissário de esgoto, as escalas de interesse deverão ser da ordem de poucos quilômetros e serão bem resolvidas através de modelo de transporte do tipo lagrangeano (CUNHA *et al*, 2003, 2002).

Os modelo eulerianos resolvem a equação de transporte sobre um malha fixa, diferentemente dos modelos lagrangeanos, onde a malha se move junto com o escalar. Os modelos tipo euleriano têm dificuldade em descrever o transporte de escalares, quando a dimensão da fonte é pequena comparada com a discretização espacial empregada. No caso de emissários, este tipo de modelo só deve ser empregado quando a malha tiver dimensões compatíveis com a dimensão do difusor, o que torna o custo computacional bastante elevado na sua simulação (CUNHA *et al*, 2002).

Uma substância dissolvida, considerada um escalar passivo, presente no meio aquático está sujeita a mecanismos de transporte associados à hidrodinâmica. O principal mecanismo atuante é a **advecção**, que é o movimento da substância feito pelo campo de velocidades da água, ao longo do fluxo unidirecional. A **difusão turbulenta** é causada por turbilhões dos mais variados tamanhos e orientações existentes no escoamento (EIGER, 1991), decorrentes de diferenças de velocidades no perfil hidrodinâmico. O espalhamento da substância pode acontecer nas duas dimensões em que o modelo trabalha, sendo que a difusão é ainda mais acentuada nos limites de contorno da área simulada, por apresentar maiores gradientes de velocidade. Este processo resulta em uma diluição da substância, ao ser distribuída para outros elementos espaciais. Existe ainda um mecanismo de transporte de ordem de grandeza muito inferior aos outros citados, a **difusão molecular**, que resulta do movimento molecular em função do gradiente de concentração, seguindo o sentido da região de maior concentração para

outra região com menor concentração. Este fenômeno decorre da energia cinética das partículas, que é diretamente proporcional à temperatura, e ocorre até mesmo em meio estático, tendo maior importância para transporte de contaminantes em solos com baixa permeabilidade e para análises de longo período. Logo, para as escalas temporal e espacial geralmente adotadas neste modelo o efeito da difusão molecular é desprezível, sendo considerada junto com a difusão turbulenta.

Segundo ROSMAN (2000), em um processo de modelagem, todo movimento ou transporte associado com as escalas de movimento resolvíveis é chamado de advecção, sendo que uma dada escala de movimento é considerada resolvível se o modelo for capaz de calcular a velocidade do escoamento naquela escala. Evidentemente, existem processos de movimento ou transporte cujas escalas não são resolvíveis pela grade numérica do modelo, chamados de difusão.

Os modelos de qualidade d'água em rios utilizam diferentes coeficientes de difusão turbulenta no sentido longitudinal do fluxo e no sentido transversal, sendo importantes para calcular a mistura da substância ao longo da seção do rio e o fator de diluição para uma determinada extensão do rio. Segundo FISCHER (1979), citado em CUNHA *et al*, 2003 (2002), o coeficiente de mistura turbulenta transversal é 40 vezes menor que o longitudinal devido, principalmente, ao fato de os gradientes de mistura transversais serem muito menores que os gradientes longitudinais. Neste estudo, o escoamento é unidimensional, portanto, só interessa a dispersão longitudinal.

A seguir é mostrada a equação de advecção-difusão para cada substância usada no modelo de qualidade d'água do SisBAHIA® Esta equação é formada por três parcelas: o transporte advectivo, o transporte difusivo e os processos de transformação. Por simplificação, mostra-se primeiramente, a equação com os termos do transporte advectivo e difusivo, que é igual para todas as substâncias, e depois os processos de transformação para cada substância específica. Sendo assim, a equação de advecção-difusão para cada substância é dada por (THOMAN & MULLER, 1987 e SHENG & VILLARET, 1989, apud CUNHA, 2001):

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + U_i \frac{\partial C_m}{\partial x_i} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(H \left[D_{ij} \delta_{jk} + \frac{\Lambda_k^2}{12} \left| \frac{\partial U_j}{\partial x_k} \right| \right] \frac{\partial C_m}{\partial x_k} \right) + \Sigma R \quad (1)$$

onde C_m é a concentração da substância de interesse, U_i são as componentes da velocidade na direção x_i promediadas na direção vertical, ΣR representa as fontes ou as perdas de massa integrada na direção vertical, H é a altura da coluna d'água, D_{ij} é o tensor que representa o coeficiente de difusão turbulenta de massa, δ_{jk} representa o delta de Kronecker e $\Lambda_k = \alpha_k \Delta x_k$ é a largura do filtro na dimensão x_k , sendo α_k um parâmetro de escala. Os valores típicos de α_k calibrados para difusão/advecção são da ordem de 0.25 a 2.0, com valor usual igual a 1.0. Na equação (1), $i, j = 1, 2$, $k = 1, 2, 3$, sendo $k = 3$ correspondente ao tempo t (no contexto $x_3 = t$), e m é dado pela concentração de cada um dos parâmetros qualidade d'água introduzidos no modelo (CUNHA, 2001)

O coeficiente D_{ij} representa a mistura devida à turbulência gerada principalmente pelo fundo, podendo ser decomposto segundo as direções longitudinal e transversal:

$$\begin{aligned} D_{xx} &= D_L \cos^2 \varphi + D_T \sin^2 \varphi \\ D_{xy} &= D_{yx} = (D_L - D_T) \sin \varphi \cos \varphi \\ D_{yy} &= D_L \sin^2 \varphi + D_T \cos^2 \varphi \end{aligned} \quad (2)$$

onde D_L e D_T são, respectivamente, os coeficientes nas direções longitudinal e transversal e φ é o ângulo entre a linha de corrente e o eixo x . O coeficiente de mistura turbulenta transversal é 40 vezes menor que o longitudinal devido, principalmente, ao fato de que os gradientes de mistura transversais são muito menores que os gradientes longitudinais. Fischer (1979), parametrizou estes coeficientes como segue:

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha(5.93|u_*|H) \\ D_T &= \beta(0.15|u_*|H) \end{aligned} \quad (3)$$

onde α e β são parâmetros incluídos para facilitar a calibração e u_* é a velocidade de atrito característica.

5 Indicadores de qualidade d'água

No modelo de qualidade d'água do SISBAHIA® são inseridos como dados iniciais alguns indicadores fundamentais para avaliar o nível de poluição do corpo d'água, os principais deles são o Oxigênio Dissolvido (OD), a Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) e o Nitrogênio (N). Cada um desses parâmetros tem uma equação relativa à sua variação de concentração ao longo do tempo, que é composta de termos correspondentes aos vários processos que, unidos, compõem a transformação global destes parâmetros.

Estes parâmetros têm grande relação entre si, o que pode ser constatado pela própria definição de DBO e OD. Ou seja, quanto maior o valor da DBO no meio aquático, maior será a necessidade de OD, e mais elevado será o seu consumo. A propósito, grande parte dos termos da equação de OD é comum à equação de DBO, pois os processos que interferem nas suas equações de balanço são interdependentes.

O nitrogênio é representado em duas formas, a amônia e o nitrato, cada qual tendo sua equação específica, semelhante às equações de OD e DBO, que são interdependentes. A amônia (NH_3), que dependendo do pH inclui também o íon amônio (NH_4^+), é a forma mais reduzida na qual o nitrogênio pode se apresentar no seu ciclo natural, e, dependendo das condições do ambiente, pode se oxidar a nitrito, que posteriormente se oxida a nitrato. O nitrito não é representado nas equações, sendo considerada apenas a transformação total do ciclo, de amônia a nitrato, onde a demanda de oxigênio necessária para acontecer este fenômeno tem papel fundamental.

A temperatura afeta as reações químicas e bioquímicas presentes no modelo, tendo também ligação estreita com a distribuição da biota e com algumas propriedades físicas da água, sem, contudo, afetar a hidrodinâmica. O modelo permite o cálculo da temperatura em função do calor específico da água, da radiação solar máxima e da umidade do ar. Nesta dissertação a temperatura é variada nas simulações apenas para verificar o seu grau de influência nos processos.

A salinidade é um dado de entrada importante para modelagem em ambientes como baías e estuários, afetando a solubilidade do oxigênio, a hidrodinâmica e a estratificação

de camadas, porém a influência nestes dois últimos fatores não é considerada pelo modelo. Ademais, para o ambiente estudado aqui a salinidade não tem relevância, pois no ambiente simulado a água é doce.

Nos itens a seguir são descritos os principais parâmetros e os processos que os envolvem. No Capítulo 6 são apresentadas as suas respectivas equações.

5.1 Oxigênio Dissolvido(OD)

A vida aquática depende diretamente da disponibilidade de Oxigênio Dissolvido (OD) na água, que é sempre empregado direta ou indiretamente nos processos metabólicos para produção de energia de qualquer organismo vivo, seja na forma livre ou combinada. Os processos aeróbios precisam de oxigênio molecular, enquanto esta forma de oxigênio é tóxica para os seres anaeróbios, que, no entanto, podem fazer uso deste elemento presente nas moléculas que participam de reações de oxi-redução, pelas quais obtêm energia.

A concentração de OD de rios e lagos é um dos principais fatores associados aos tipos de organismos encontrados, pois para concentrações de OD inferiores a 2 mg/l nenhuma vida aeróbia superior se desenvolve, e os peixes mais nobres, próprios de água fria, exigem concentração de OD de no mínimo 5 mg/l (SAWYER, 1978). O principal uso de recursos hídricos afetado pelas variações de OD é a preservação de peixes, abrangendo a sobrevivência e reprodução (THOMAN&MUELLER, 1987). Já os microrganismos decompositores têm requisitos menores de oxigênio, sobrevivendo até faixas próximas a zero, vencendo a competição com outros seres quando há disponibilidade de matéria orgânica degradável. Existem alguns gêneros de alga capazes de metabolizar diretamente matéria orgânica e, também, fazer fotossíntese; este tipo de metabolismo restrito a poucos microrganismos se denomina mixotrofia (MENDONÇA, 2000).

A concentração de OD é usada como um dos principais indicadores de qualidade da água para corpos hídricos, representando as condições para sobrevivência e até mesmo influenciando diretamente a distribuição espacial das espécies no ambiente.

Tabela 1: Condições para a vida aquática

Condição do rio	DBO, 20°C mg/L	Aspecto Estético	OD, % da saturação	Condição de vida dos peixes
Muito Limpo	1	bom	80%	vida aquática
Limpo	~2	bom	80%	vida aquática
Relativamente limpo	~3	bom	80%	vida aquática
Duvidoso	~5	turbidez	50%	só os mais resistentes
Podre	~7,5	turbidez	50%	só os mais resistentes
Mau	~10	mau	quase nulo	difícil
Péssimo	~20	mau	quase nulo	difícil

(FONTE: JORDÃO, 1995)

A taxa de OD na água tem relação direta com a pressão podendo-se calcular suas concentrações em condição de equilíbrio por meio da Lei de Henry. Embora esta condição de equilíbrio não seja encontrada no ambiente, devido aos processos bioquímicos e físicos que variam constantemente, esta equação ainda é usada isoladamente para estimativas aproximadas. A lei de Henry é expressa por uma equação linear simples onde uma constante de proporcionalidade do gás é multiplicada pela pressão, resultando no valor da solubilidade do gás.

A solubilidade tem relação inversa com a temperatura. Assim como quase todos os gases, o oxigênio diminui a solubilidade à medida que a temperatura do líquido se eleva. A diminuição da solubilidade do oxigênio na água à medida que a temperatura se eleva é um dos efeitos da poluição térmica de rios e lagos. O efeito é particularmente grave em lagos profundos pois a água quente é menos densa do que a água fria, tendendo a permanecer na superfície e, assim, impedir a transferência de oxigênio para as camadas inferiores (BROWN, 1997). A Equação 4 é usada no SisBAHIA® para determinar a saturação de OD, C_s (mg/l):

A faixa de valores mínimos e de médias diárias permitidos para OD é ampla e reflete a aplicação de variados níveis de OD para diferentes usos da água. Vale incluir as exceções e frequências de ocorrência ao estipular os limites requeridos. Os padrões internacionais geralmente contemplam uma zona de mistura dentro da qual os níveis de OD podem ser inferiores aos exigidos. As especificações da zona de mistura variam bastante de acordo com o local (THOMANN&MULLER, 1987).

$$\ln(C_s) = -139,34 + \frac{1,5757 \cdot 10^5}{T} - \frac{6,6423 \cdot 10^7}{T^2} + \frac{1,2438 \cdot 10^{10}}{T^3} - \frac{8,6219 \cdot 10^{11}}{T^4} - S \left(1,7674 \cdot 10^{-2} - \frac{1,0754 \cdot 10^1}{T} + \frac{2,1407 \cdot 10^3}{T^2} \right) \quad (4)$$

Onde T = temperatura (°C) e S = salinidade (mg/l).

Ao longo da coluna d'água em corpos hídricos existem grandes variações das taxas de OD, sendo que as descontinuidades no perfil de concentração são ainda mais acentuadas onde a circulação hidrodinâmica é menos intensa, havendo menor homogeneização. Vários fatores físico-químicos e biológicos guardam relação com este fenômeno, mas de modo geral pode-se afirmar que isto está relacionado com a distribuição de fontes e sumidouros ao longo da coluna d'água.

A análise padrão de OD preconizada pelo *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater* APHA-AWWA-WPCF, é feita pelo método Winkler, com o qual se mede a concentração por titulação direta das amostras. No entanto, para um monitoramento ambiental que demanda séries temporais e espaciais, os instrumentos de medição direta com eletrodos (sondas) são mais empregados por possibilitar o acompanhamento contínuo da variação de OD e facilitar o manuseio dos numerosos dados. Os equipamentos atuais fornecem medições com boa precisão e praticidade para utilização, enquanto o método Winkler torna mais trabalhosa e onerosa a obtenção de dados para o uso na modelagem de qualidade de água, além de ter limitação para casos de grande atividade bacteriana, sendo empregado apenas para a calibração da sonda.

5.1.1 Balanço de Oxigênio

Ao fazer o balanço de oxigênio em um sistema simples, se tem o somatório de entradas e saídas do reator, além das reações de produção e consumo que acontecem no seu interior. Os ambientes estudados pelo SisBAHIA® têm um domínio extenso em que se leva em conta a circulação hidrodinâmica e se deseja saber as variações de concentração de determinada substância dentro de um intervalo de tempo no domínio considerado. Grosso modo, equivale a vários reatores infinitesimais onde, em cada passo de tempo acontecem as reações de variação de concentração e os fenômenos de transporte,

modificando a distribuição espacial e temporal da substância. Este ciclo é repetido até o final de um intervalo de tempo definido para se processar a simulação.

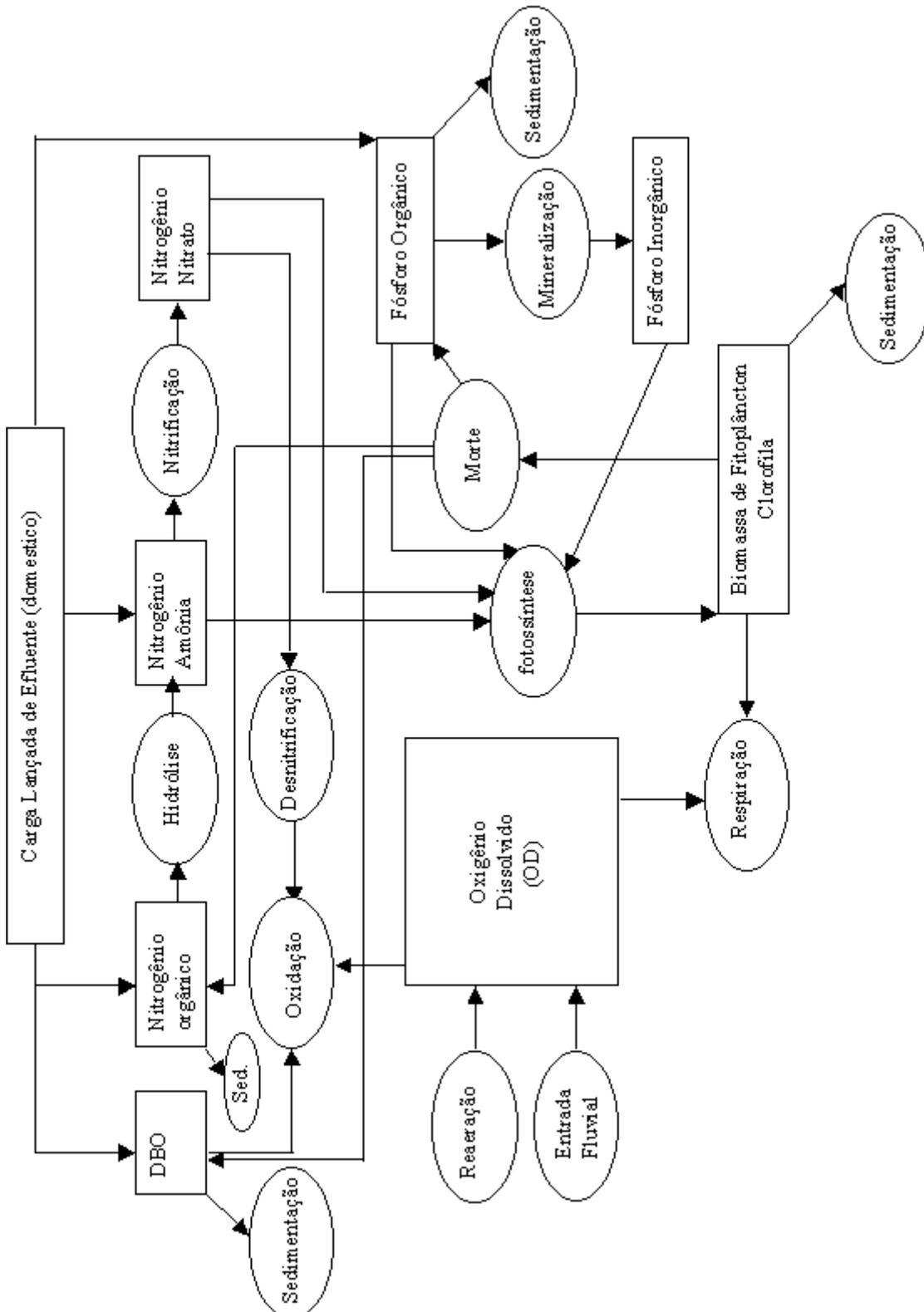
“Autodepuração é a soma de todos os processos que levam a água poluída de volta ao seu estado normal original”. A definição de autodepuração registrada por STEINMANN e SURBECK em 1918 (TSIVOGLOU&NELL, 1976) é simples e permanece razoavelmente adequada, porém, atualmente existe um entendimento mais aprofundado sobre os conceitos de “água poluída” e “estado normal original”, para os quais já existem os padrões estabelecidos pelas normas, deixando de ser meramente subjetivos. Desta forma, água poluída é definida como aquela que está fora dos padrões estabelecidos para o seu uso e/ou para sua classe de enquadramento, e o “estado normal original” é alcançado parcialmente, pois alguns índices podem ser recuperados, mas por menos nociva que seja, sempre acontece a introdução no meio aquático de subprodutos provenientes da transformação da matéria orgânica.

Por um ponto de vista mais abrangente, na recuperação de um rio podem ser avaliados outros importantes elementos prejudiciais para a qualidade de água que são passíveis de sofrer decaimento de concentração, como microrganismos patogênicos, material radioativo e tóxicos degradáveis. Estes constituintes que sofrem variação de concentração são chamados não conservativos, não inertes ou reativos. A cinética destes decaimentos pode ser acoplada ao modelo hidrodinâmico, desde que se trate de um escalar passivo, ou seja, que não afeta a hidrodinâmica. Entretanto, esta dissertação aborda o significado consagrado de autodepuração, largamente usado em livros atuais de engenharia sanitária e ambiental, que se refere ao decaimento de concentração da matéria orgânica por meio de processos naturais, dando ênfase ao ciclo dos compostos nitrogenados e associado à recuperação dos níveis de oxigênio no meio. O fluxograma dos processos que compõem o ciclo de oxigênio está representado na Figura 2 .

Caracterizar o potencial de autodepuração de um corpo hídrico, sua eficiência natural e os principais mecanismos envolvidos é importante, ao utilizar o próprio fluxo d'água no sistema natural com o intuito de maximizar o rendimento deste processo. Ademais, mesmo que sejam tratadas as fontes pontuais, sempre que um rio passa por uma região com atividades agrícolas e urbanas existirá uma contribuição pontual de difícil controle e uma difusa incontrolável, ou seja, sempre haverá necessidade de uma autodepuração

dos rios para se obter uma qualidade de água melhor nos corpos receptores (SALATI, 1996)

Figura 2: Processos envolvendo oxigênio no modelo (CUNHA, 2001)



5.1.2 Consumo de Oxigênio

As águas constituem ambientes bastante pobres em oxigênio, em virtude de sua baixa solubilidade. Enquanto no ar a sua concentração é da ordem de 270 mg/l, na água, nas condições normais de temperatura e pressão, a sua concentração se reduz a 9,17 mg/l. Desta forma, qualquer consumo em maior quantidade traz sensíveis repercussões quanto ao teor de oxigênio dissolvido na massa líquida (VON SPERLING, 1996a).

O consumo resultante da oxidação da matéria orgânica carbonácea pode ser dividido em dois setores: no sobrenadante, ou seja, a parcela que se encontra dissolvida no meio líquido; e nos sedimentos, que é o material particulado e grosseiro que se deposita no leito do rio formando lodo e servindo de substrato para a comunidade bentônica. Os processos que envolvem o oxigênio consumido na estabilização dos compostos nitrogenados também são de suma importância para o balanço de massa.

O item aqui apresentado se reporta à distribuição espacial dos processos de consumo de oxigênio que acontecem no meio aquático, e para isso também é fundamental identificar como a matéria orgânica se espalha no meio aquático em função da sua granulometria. Os sólidos de maneira geral se apresentam na água em três formas: dissolvida, coloidal ou em suspensão, sendo a distribuição granulométrica das partículas uma característica de relevante influência no seu transporte, na velocidade de sedimentação e na sua velocidade de degradação, em função da interface de contato para ocorrerem as reações. Na classificação usada, se considera que o material em suspensão tem dimensões acima de 1 μm , as partículas coloidais têm diâmetros entre 1 e 0,001 μm e os sólidos dissolvidos têm diâmetro inferior a 0,001 μm (VON SPERLING, 1996a).

Por convenção, para a análise de sólidos se utiliza a filtração através do filtro de diâmetro de abertura 0,45 μm , sendo que as partículas de menores dimensões, capazes de passar pelos pequenos orifícios, correspondem ao material dissolvido, enquanto as de maiores dimensões, retidas pelo filtro, são consideradas sólidos em suspensão. A rigor, os termos sólidos filtráveis e sólidos não filtráveis são mais adequados. Os sólidos coloidais, de difícil identificação por filtração, são classificados em sua maior parte como sólidos dissolvidos (VON SPERLING, 1996a), o que também é mais adequado do ponto de vista hidrodinâmico.

A parcela solúvel é assimilada com maior facilidade pelos decompositores, podendo penetrar diretamente através da membrana celular. As partículas em suspensão, por sua

vez, são consumidas mais lentamente devido a ter uma relação área superficial/volume menor, o que diminui o contato dos microrganismos com o substrato. Entretanto, as bactérias se encarregam de diminuir o tamanho das partículas, ao lançar no meio aquático exoenzimas que ajudam a desfazer a coesão e catalisam a quebra de ligações químicas. Nestas reações não há utilização de aceptores de elétrons, não havendo consumo de oxigênio diretamente, porém a interface de contato das bactérias com o substrato é aumentada, acarretando como efeito secundário o incremento no consumo de OD para a respiração celular.

O padrão do transporte das partículas suspensas é bem diferente das dissolvidas, pois parte delas possui tamanho e peso suficientes para sofrer ação da gravidade e de forças de oposição ao movimento. Uma parcela destas partículas é capaz de sedimentar próximas ao ponto onde são introduzidas, outras tem a ação da gravidade diminuída pelo arraste e descrevem trajetórias mais longas antes de se depositar no fundo. As partículas dissolvidas e coloidais, que normalmente não têm um movimento vertical definido, podem passar por fenômenos de floculação natural por agentes químicos e biológicos, além da precipitação e adsorção, deixando o meio sobrenadante e se depositando no lodo do fundo, em flocos ou agregadas a outras partículas maiores.

Os organismos decompositores são os principais responsáveis pela oxidação da matéria orgânica. Estes podem ser fungos, protozoários e bactérias heterotróficas, sendo este último grupo o de maior presença e importância no decaimento de DBO (VON SPERLING, 1996b).

O esgoto doméstico apresenta considerável parcela de compostos orgânicos, isto é, moléculas de alta estrutura e elevado potencial energético que podem constituir alimento de seres heterotróficos como peixes, protozoários e bactérias. Ao assimilar estes alimentos, bactérias e outros seres aeróbios transformam compostos orgânicos de cadeias mais complexas, como proteínas e gorduras em aminoácidos, amônia, ácidos graxos e outros. Estes processos aeróbios se fazem à custa de oxigênio existente no meio, o qual pode se extinguir por completo. Na seqüência, a comunidade aeróbia é substituída por seres anaeróbios, que prosseguem na degradação do material poluidor em ausência de oxigênio. Nestas condições, também ocorre a remoção de compostos de nitrogênio do meio aquático, através da nitrificação.

Existindo grande disponibilidade de matéria orgânica no sistema os seres decompositores encontram condições favoráveis para proliferação, havendo também um grande consumo de oxigênio por esta comunidade, que possui baixos requisitos deste elemento para sobrevivência e vencem a competição biológica com organismos superiores. A depleção de oxigênio elimina as espécies que não são capazes de sobreviver em concentrações inferiores, comprometendo a diversidade biológica em número de espécies e em número de indivíduos dentro da mesma espécie.

Com a estabilização do processo de oxidação dos compostos orgânicos, diminui o consumo de oxigênio e aumenta progressivamente as possibilidades de reoxigenação do meio. Ao mesmo tempo, a sedimentação de matéria em suspensão, formando bancos de lodo no fundo leva a uma crescente clarificação do meio, permitindo cada vez mais a penetração de luz, com maior proliferação de algas e outros seres fotossintetizantes. O crescimento das algas, beneficiado pela grande quantidade de nitratos e fosfatos resultantes da oxidação da matéria orgânica, pode elevar a concentração de oxigênio até valores acima do ponto de saturação padrão.

O modelo usado não considera o movimento vertical das substâncias, portanto, não descreve o movimento de sedimentação que naturalmente ocorre com o material particulado e substâncias agregadas, o que pode abranger parcela significativa de compostos de carbono e nitrogênio. Contudo, nas equações de balanço da matéria orgânica esta perda foi quantificada e inserida como parâmetro inicial, considerando que uma porcentagem do material se deposita no fundo, porém sem admitir a sua ressuspensão para a coluna d'água. Este termo da equação considera a velocidade de deposição do sedimento orgânico, o percentual de matéria orgânica dissolvida e a altura da coluna d'água.

Tendo em vista os fatores que influem na sedimentação, é possível concluir que setores com velocidades mais lentas, como zonas de recirculação (zonas mortas) proporcionam maior deposição de lodo orgânico e sedimentos em geral, em função do material sedimentável permanecer por um tempo maior para descrever a trajetória vertical e encontrar um meio menos turbulento. Estas condições ideais são buscadas ao se dimensionar unidades de tratamento como caixas de areia e decantadores.

HVITVED-JACOBSEN (1982) considerou o efeito de descargas orgânicas nas concentrações de oxigênio dissolvido de um pequeno rio. Sua pesquisa indicou que somente 4% da matéria orgânica lançada foi biologicamente degradada em uma extensão de 5 km. Em comparação, aproximadamente 35% da matéria orgânica foi removida por sedimentação para o leito do rio, e o restante foi carregado para jusante do trecho estudado.

WUHRMANN (1972) estimou que entre 90% e 99,9% da biomassa em rios com menos de 1,5m de coluna d'água existem como biofilme, ou seja, película de biomassa aderida a um meio suporte, que neste caso são os sedimentos e lodo do leito do rio. O importante papel desempenhado por esta parcela de microrganismos que cresce aderida, levou à sua aplicação no desenvolvimento de reatores biológicos para tratamento de esgoto, que contam com núcleos apropriados para a fixação dos biofilmes.

É comum haver anaerobiose na camada de lodo do fundo que não tem contato com o oxigênio presente na coluna d'água, sendo tanto maior esta atividade quanto maior for a espessura da camada, pois o oxigênio somente se difunde na porção mais superficial. A conversão dos compostos em gases pode criar bolhas no interior do lodo de fundo e diminuir sua densidade, desta forma facilitando a sua ressuspensão, principalmente quando ocorre associado ao revolvimento, cujos principais fatores causadores são o aumento da velocidade de escoamento e da turbulência.

5.1.3 Introdução de Oxigênio

O oxigênio pode ser introduzido no sistema por duas formas principais: como subproduto da fotossíntese realizada por organismos autotróficos para fixar o carbono (forma endógena) ou pela reaeração proporcionada pela interface da superfície livre da água com a atmosfera (forma exógena). Nas reações de oxi-redução para obtenção de energia (quimiossíntese) realizada por microrganismos em condições anóxicas e anaeróbias também pode haver liberação de oxigênio no meio, oriundo de compostos de nitrogênio, fósforo e enxofre que são reduzidos, porém a quantidade proveniente destas fontes não é considerada no modelo.

5.1.3.1 Reoxigenação por Fotossíntese

A fotossíntese é o fenômeno pelo qual vegetais, algas e algumas espécies de bactérias produzem todos os compostos orgânicos que formam a base da cadeia alimentar a partir do gás carbônico (CO₂) e da água (H₂O). Neste processo, os organismos autótrofos convertem a luz solar em energia própria para realizar a reação, sendo o oxigênio molecular (O₂) um subproduto que é liberado no meio aquático. A fotossíntese pode ser descrita genericamente pela Equação 5.



Os seres produtores, todavia, também realizam a respiração durante o dia inteiro a fim de produzir energia para manter suas atividades vitais, fazendo-se perceber principalmente durante o período noturno. Neste processo verifica-se o consumo do oxigênio presente no meio aquático, devendo ser contabilizado para o balanço deste elemento no sistema. Ao se avaliar a contribuição de oxigênio proveniente dos seres autotróficos, usualmente se descontam também as perdas por respiração para se obter a produção líquida deste elemento por estes organismos (THOMANN&MULLER, 1987).

A intensidade luminosa indica a quantidade de energia que poderá ser utilizada nas reações de fotossíntese para fixação de carbono. Isto determina as variações da atividade fotossintética ao longo do dia e as variações sazonais ao longo do ano. Durante o dia há uma significativa variação, atingindo o valor mínimo de concentração de oxigênio no período que precede a alvorada e a taxa máxima no meio da tarde, quando este valor pode até superar a concentração de saturação (Figura 3).

A fotossíntese é o processo mais complexo entre os que compõem o balanço de oxigênio em meios aquáticos, por envolver muitas variáveis ambientais de difícil determinação e controle, especialmente as variáveis biológicas. Apesar da existência de modelos simples e validados para um crescimento de algas limitado por nutrientes (DROOP, 1983), um tratamento acurado da cinética deste crescimento continua a ser um desafio significativo (STERNER&GROVER, 1998). Existem modelos mais complexos, integrados à hidrodinâmica, específicos para abordar este fenômeno, utilizados principalmente em corpos d'água sujeitos à floração (*bloom*) de algas e vegetais causado pela eutrofização.

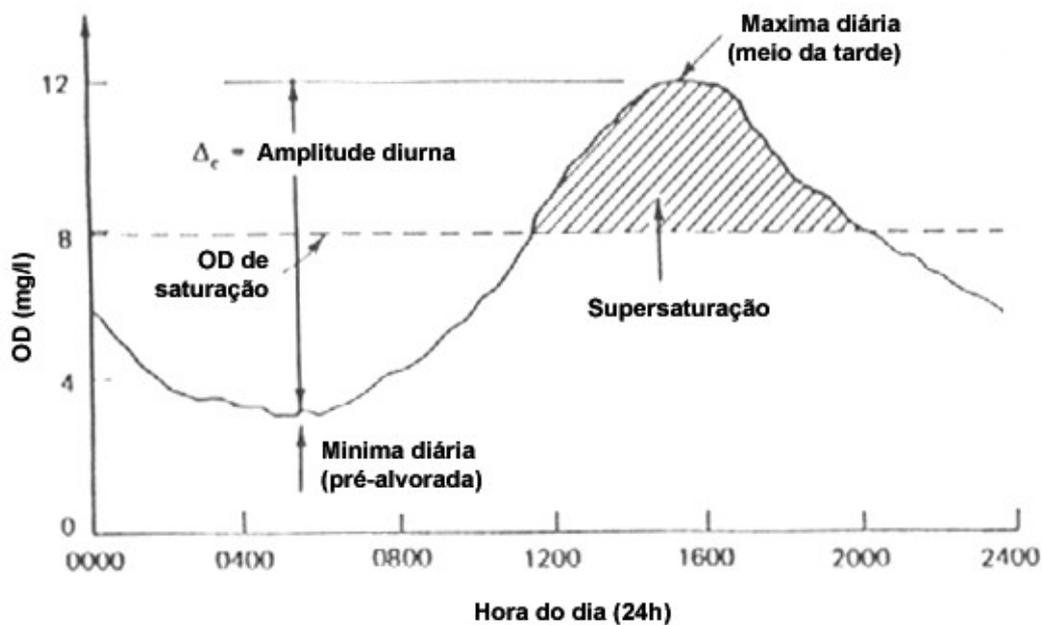


Figura 3:Variação diária de OD, devida à fotossíntese por plantas aquáticas (THOMANN&MULLER, 1987)

Em alguns casos, é dada maior ênfase à presença de fitoplânctons, ou seja, as plantas microscópicas aquáticas que tem maior mobilidade (“plankton” é uma palavra grega que significa errante). As plantas aquáticas de maior porte também são importantes e podem estar fixadas (macrófitas aquáticas enraizadas) ou flutuando livremente. Por último, as algas aderidas a rochas, caules de plantas e outras superfícies também podem ser importantes. (THOMANN&MULLER, 1987) O decaimento destes organismos pode ter grande importância no consumo de oxigênio, necessário para estabilizar esta matéria morta.

Por ser um processo pelo qual se formam moléculas que compõem a própria estrutura dos seres vivos, é fundamental que também estejam disponíveis, além do gás carbônico, os nutrientes e traços de algumas substâncias que completam as reações fotossintéticas.

As águas tranquilas são melhor reoxigenadas por fotossíntese, pois as pequenas velocidades ocasionam a deposição de partículas em suspensão facilitando a fixação de vegetais e a penetração da luz, indispensável à fotossíntese, além de favorecer a permanência do plâncton, que se mantém em suspensão no sistema, sem ser carregado para outros trechos.

5.1.3.2 Reaeração atmosférica

A transferência de moléculas de oxigênio da atmosfera para a película superficial da água acontece imediatamente através da difusão nesta interface. Esta absorção se dá de forma rápida, porém o transporte de oxigênio para as camadas inferiores ocorre com maior dificuldade, a menos que haja uma agitação que proporcione a contínua fragmentação e mistura desta película enriquecida com o restante da massa líquida (TSIVOGLU&NELL, 1976)

Contudo, este fluxo de oxigênio também ocorre no sentido inverso, em um intercâmbio contínuo que só é estabilizado quando o OD na fase líquida atinge sua **Concentração de Saturação (C_s)**. Para a taxa de oxigênio introduzido na água superar a quantidade perdida, deve existir um déficit deste no meio aquático, o que acontece constantemente devido ao seu consumo por decomposição e respiração. A taxa cinética da reaeração é diretamente proporcional ao valor desta diferença entre a concentração de oxigênio existente no sistema e a máxima que pode ser alcançada.

Conhecendo-se o déficit de oxigênio e suas variações de concentração ao longo do tempo, pode ser obtido experimentalmente o **Coefficiente de Reaeração (K_a)**, que depois tem seu valor calculado por meio de análise de regressão.

São vários os fatores físicos ambientais que influenciam a reaeração, tendo a temperatura como o principal deles. A temperatura, assim como em outros processos de balanço de oxigênio, possui um fator de correção no cálculo da reaeração representado por Θ_a , tendo por padrão o coeficiente para 20°C. Como todos os gases, o oxigênio reduz a solubilidade à medida que a temperatura aumenta, por outro lado, a elevação da energia térmica do líquido favorece os mecanismos de transferência do oxigênio, como a difusão molecular. A determinação do balanço entre estes dois fatores é feita empiricamente. A pressão atmosférica, outra variável de estado, pode ser desprezada no cálculo por ter menor relevância para o processo e pouca variação.

Tabela 2: Valores do coeficiente K_a segundo modelos baseados em dados hidráulicos (base e, 20°C)

Pesquisador	Fórmula	Faixa de aplicação
--------------------	----------------	---------------------------

O'Connor e Dobbins (1958)	$3,73.v^{0,5}H^{-1,5}$	0,6m < H < 4,0m 0,05m/s < v < 0,8m/s
Churchill et al (1962)	$5,0.v^{0,97}H^{-1,67}$	0,6m < H < 4,0m 0,8m/s < v < 1,5m/s
Owens et al (1976)	$5,3.v^{0,67}H^{-1,85}$	0,1m < H < 0,6m 0,05m/s < v < 0,8m/s

NOTAS:

v = VELOCIDADE DO CURSO D'ÁGUA (M/S)

H = ALTURA DA LÂMINA D'ÁGUA (M)

FAIXAS DE APLICABILIDADE ADAPTADAS E LIGEIRAMENTE MODIFICADAS DE COVAR (APUD USEPA, 1985), PARA EFEITO DE SIMPLICIDADE

[Fonte: VON SPERLING, 1996A]

As características hidráulicas do corpo hídrico importantes para a reaeração são a turbulência, e vazão e profundidade, sendo utilizados para calcular os coeficientes de reaeração para canais. As propriedades do oxigênio que alteram a cinética da reaeração são sua resistência específica à transferência e sua pressão parcial (TSIVOGLU&NELL, 1976), porém seus valores não são utilizados no cálculo do coeficiente.

A literatura relata diversas formulas, conceituais e empíricas, relacionando K_a com a profundidade e velocidade do curso d'água. A Tabela 2 apresenta três das principais fórmulas, com faixas de atuação que se complementam (VON SPERLING, 1996). Os valores de velocidade e altura de lâmina d'água são bastante limitados para definir os coeficientes de reaeração para os ambientes geralmente simulados pelo SisBAHIA®, porém servem como referência para modelagem em canais e rios, e para formulação de outras equações aplicáveis a cenários semelhantes.

Escoamentos que ocorrem com maior velocidade numa superfície livre são mais turbulentos e tendem 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 que essas trocas ocorrem. Conseqüentemente, o oxigênio atmosférico penetra mais rapidamente no meio aquático, e os gases resultantes da decomposição anaeróbia podem deixar o meio aquático com a mesma rapidez. A turbulência afeta bastante os processos que dependem da troca de gases com a atmosfera. (BRAGA, 2002). Donde se depreende que por este mecanismo os rios recebem um maior aporte de oxigênio do que lagoas, que, por outro lado, usualmente contam com uma ação fotossintetizante mais intensa. Corredeiras, saltos e quedas

d'água em geral podem ter seu potencial hídrico utilizado para funcionarem como aeradores naturais.

Os corpos hídricos rasos tem uma menor altura de lâmina d'água a ser vencida pelo oxigênio que adentra a superfície livre e é transferido para as camadas mais profundas. Se medirmos a área superficial de um segmento de um rio, por exemplo, e dividirmos pelo seu volume encontraremos valores mais altos para segmentos mais rasos, que podem ser relacionados com os valores de K_a . A Tabela 3 mostra alguns valores típicos de K_a para corpos d'água rasos e profundos (VON SPERLING, 1996a)

Tabela 3: Valores típicos de K_a (base e, 20°C)

Corpo d'água	K_a (dia⁻¹)	
	Profundo	Raso
Pequenas lagoas	0,12	0,23
Rios vagarosos, grandes lagos	0,23	0,37
Grandes rios com baixa velocidade	0,37	0,46
Grandes rios com velocidade normal	0,46	0,69
Rios rápidos	0,69	1,15
Corredeiras e quedas d'água	>1,15	1,61

[Fonte: FAIR et al, 1979; ARCEIVALA, 1981; apud VON SPERLING, 1996a]

5.2 Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO)

A Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) é um indicador indireto de matéria orgânica biodegradável, determinado pela quantidade de oxigênio necessária para que os microorganismos estabilizem a matéria orgânica presente. Este parâmetro é o mais importante no controle das atividades poluidoras, sendo utilizado na avaliação de eficiência de unidades de tratamento de esgoto e na definição de limites de descarte de carga orgânica.

A DBO é o indicador de matéria orgânica utilizado neste estudo, por ser o único que está relacionado exclusivamente com o metabolismo bioquímico que ocorre naturalmente no ambiente, e por isso retrata melhor do que outros indicadores o processo de oxidação. A grande vantagem deste conceito é que resíduos distintos podem ter os respectivos potenciais poluidores comparados segundo uma mesma grandeza (EIGER, 1991). Este parâmetro permite quantificar o impacto causado indiretamente na biota pelo lançamento de material orgânico. Ressalte-se que o impacto é indireto por diminuir o oxigênio no meio, mas a DBO em si não significa um indicador de toxicidade, pois não representa nenhum dano direto aos seres vivos.

O método de análise para DBO mede a quantidade de oxigênio consumido em um litro de amostra em um certo tempo e em uma determinada temperatura. O padrão usado é para 5 dias a 20°C, que representa 70% a 80% da DBO total (SAWYER, 1978). Outro índice também usado como referência é a Demanda Última de Oxigênio (DBO_u), que é a DBO exercida após 20 dias, a partir da qual a quantidade de oxigênio a ser consumida é desprezível. A DBO_u é considerada em termos práticos como o total do oxigênio que pode ser utilizado nas reações bioquímicas.

Durante a análise da DBO, condições de luminosidade são sempre mantidas controladas a fim de evitar a produção de oxigênio por organismos fotossintéticos que eventualmente existam na amostra analisada, quantificando exclusivamente o oxigênio consumido por atividade bioquímica. O recipiente contendo a amostra deve estar vedado, a fim de se evitar a reaeração do líquido enquanto o nível de oxigênio diminui.

A matéria orgânica só pode ser degradada se houver no meio outros elementos essenciais para completar reações metabólicas realizadas pelos decompositores, como

nutrientes e micronutrientes, sem os quais o substrato permanece inalterado ao longo do tempo, podendo erroneamente ser considerado inerte. Da mesma forma, na presença de elementos tóxicos, os seres decompositores tanto podem morrer quanto podem não realizar suas funções vitais de reprodução e alimentação, e assim não modificar a matéria orgânica.

A concentração de DBO típica em esgotos domésticos varia em torno de 300 mg/l, podendo chegar a 20.000 mg/l para efluentes de matadouros, em função do alto volume de sangue e restos de tecidos de animais, ou ser nula em indústrias de vidro e cimento (VON SPERLING, 1996a), que contam com efluentes inorgânicos. A contribuição per capita de DBO varia muito com relação aos hábitos alimentares da população e com o nível de desenvolvimento, sendo adotado usualmente para os padrões brasileiros os valores clássicos determinados por FAIR (1979), isto é, 54 g DBO/hab.dia.

Outro importante indicador indireto de matéria orgânica é a Demanda Química de Oxigênio (DQO), que é a quantidade de oxigênio necessária para oxidar quimicamente, por via enérgica, a matéria orgânica presente em um litro de amostra. A via é enérgica porque o método é realizado com temperatura em torno de 140°C, em meio ácido (com ácido sulfúrico) e agentes oxidantes fortes (geralmente dicromato de potássio). A grande vantagem deste indicador é a rapidez de sua análise - o ensaio tradicional é feito em duas horas - o que faz este ensaio sempre preceder a determinação da DBO para estimativa de alíquotas de ensaio. Compostos tóxicos e refratários, que não são passíveis de degradação pelos microrganismos que exercem a DBO, podem ser oxidados através do ensaio de DQO. Devido à sua praticidade, a análise de DQO é até mais executada do que a DBO, principalmente para efluentes industriais. No entanto, para a modelagem ambiental a DBO é mais adequada, pois traduz melhor os mecanismos naturais de transformação da matéria orgânica no meio aquático e a velocidade com que acontecem, além de permitir quantificar o oxigênio necessário para conversão dos compostos nitrogenados, o que não é possível através da DQO.

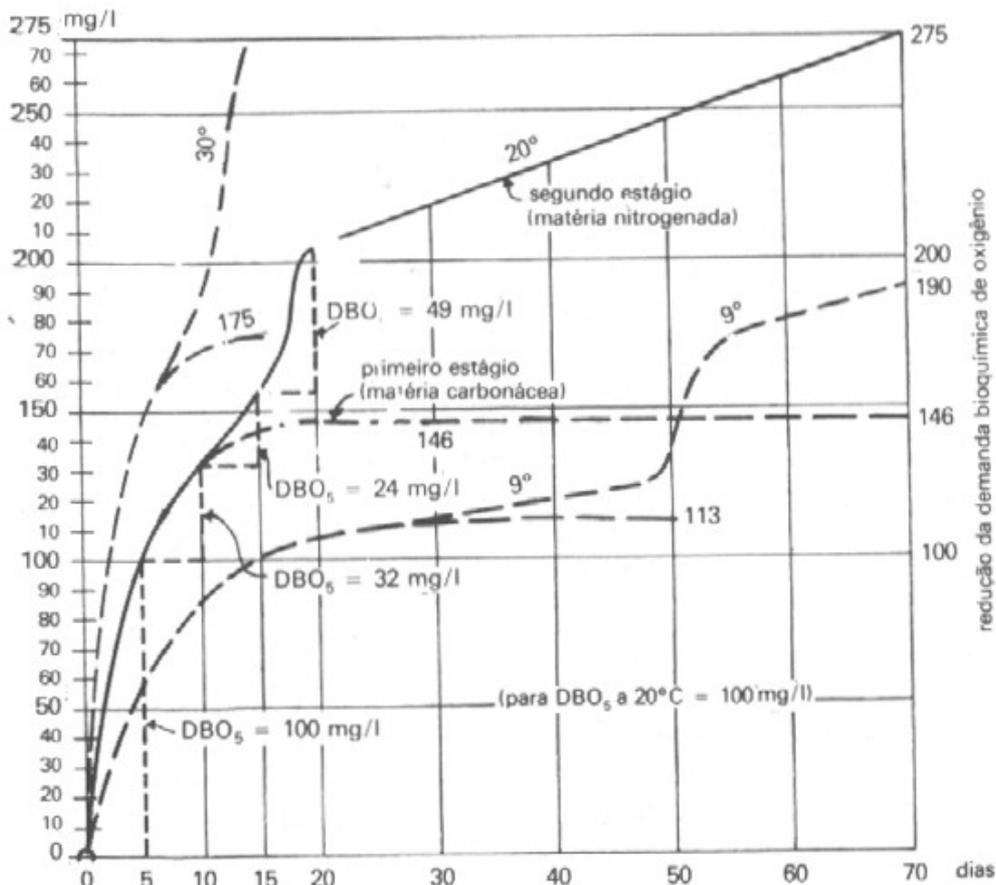


Figura 4: Redução da DBO de esgoto fresco, segundo Theriault (IMHOFF, 1985)

A cinética de decaimento da DBO já foi amplamente estudada em diversas situações, sendo apresentada como sendo uma equação diferencial de primeira ordem, para os cinco dias iniciais. Isto se dá por conta da decomposição de matéria carbonácea realizada pelo grande número de bactérias saprófitas, podendo se considerar como uma espécie de organismo metabolizando um tipo de alimento (SAWYER, 1978). Além destas, existem também, em número bem menor, bactérias nitrificantes no esgoto bruto, cuja multiplicação da população acontece mais lentamente e seu aumento na demanda por oxigênio só é significativo por volta de 6 a 10 dias do início da análise (METCALF& EDDY, 1981; IMHOFF, 1985). Neste ponto se verifica um grande salto no gráfico, e o consumo de material nitrogenado se prolonga por extenso lapso de tempo (Figura 4). Este consumo de oxigênio não é contabilizado na equação da DBO do modelo, estando presente na parcela específica da nitrificação e de oxigênio dissolvido. Assim, pode-se dizer que a degradação bioquímica das substâncias orgânicas em água contendo oxigênio se desenvolve ao longo do tempo em dois estágios. O primeiro estágio é quando são metabolizados os compostos carbonáceos, e no segundo estágio prevalece a oxidação de compostos nitrogenados (METCALF& EDDY, 1981;

IMHOFF, 1985). Quando se deseja determinar apenas o oxigênio consumido para a degradação da matéria carbonácea durante a análise, pode-se utilizar agentes inibidores da ação de bactérias nitrificantes (METCALF& EDDY, 1981; IMHOFF, 1985; SAWYER, 1978)

A diferenciação do consumo de matéria orgânica nitrogenada e carbonácea, se baseia em princípios básicos que governam o crescimento dos microrganismos. Este modelo de crescimento tem, mais ou menos, quatro fases diferenciadas (METCALF, 1981), apresentadas na Figura 5.

1. Fase de Retardo – Após a adição de um número de organismos a um meio de cultivo, a fase de retardo representa o tempo requerido para que os organismos se aclimatem às suas novas condições ambientais.
2. Fase de crescimento logarítmico – Durante este período, a célula se divide em uma velocidade determinada por seu tempo de geração e sua capacidade de processar o alimento (taxa constante de crescimento percentual).
3. Fase estacionária – Neste caso a população permanece estacionária. As razões que se apontam para este fenômeno são: *a)* que as células esgotaram o substrato ou nutrientes necessários para o crescimento, e *b)* que o crescimento de novas células se nivela pela morte de células velhas.
4. Fase de morte logarítmica – Durante esta fase, a taxa de morte de bactérias excede a produção de novas células. A taxa de morte geralmente é função da população viável e das características ambientais. Em alguns casos, a fase de morte logarítmica é o inverso da fase de crescimento logarítmico.

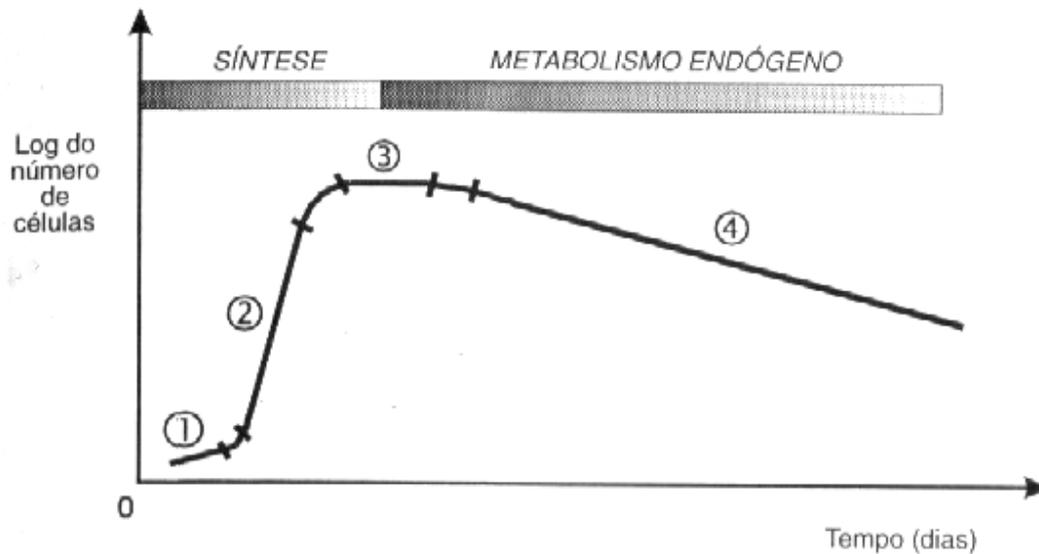


Figura 5: Progressão temporal do crescimento bacteriano (VON SPERLING, 1996b), sendo: 1) Fase de retardo; 2) Fase de crescimento logarítmico; 3) Fase estacionária; 4) Fase de morte logarítmica

A taxa da reação de consumo é proporcional à quantidade de matéria orgânica oxidável restante a qualquer momento, na medida em que é modificada pela população de organismos ativos. À medida que a população de organismos alcança um nível onde somente pequenas variações ocorrem, a taxa de reações é controlada pela quantidade de alimento disponível para os organismos (SAWYER, 1978). Não faz parte do escopo deste trabalho questionar o cálculo matemático ou o ajuste gráfico da curva, uma vez que o padrão matemático para DBO exercida aqui é amplamente empregado, e as variações nas equações se restringem aos valores dos coeficientes.

No ambiente a cinética de degradação da matéria orgânica é incrementada por fatores hidráulicos que promovem uma maior mistura, diluição e redução. Os gradientes de velocidade aumentam as tensões de cisalhamento (LEU *et al*, 1998), podendo também favorecer a divisão das partículas presentes no efluente descartado em outras menores, aumentando a área superficial de interação de microrganismos com o material biodegradável para se efetuar a hidrólise e outras reações de metabolismo. As partículas grosseiras podem dificultar a ação biológica na estabilização de matéria orgânica, podendo ser diminuídas em tamanho também pela ação de enzimas.

LEU *et al* (1998) desenvolveram um modelo de OD-DBO para canais, com decaimento de primeira ordem. A principal contribuição de seu trabalho é relacionar a influência do número de Reynolds sobre a constante de decaimento. Com dados obtidos em laboratório, os autores definem uma relação entre o número de Reynolds e a constante de decaimento, mostrando que a constante é diretamente proporcional ao número de Reynolds, ou seja, quanto mais turbulento é o fluxo, maior é o decréscimo de matéria orgânica.

A taxa de matéria orgânica degradada em DBO exercida ($\text{mg O}_2/\text{l}$) por unidade de tempo (dias) é o Coeficiente Cinético de oxidação de matéria carbonácea K_D . A velocidade com que isso acontece depende de alguns fatores do meio aquático: a disponibilidade de macronutrientes e micronutrientes, temperatura, pH, quantidade e espécies de microrganismos, além das características físicas e bioquímicas da matéria orgânica.

O coeficiente cinético de oxidação serve como parâmetro para definir o tempo necessário para certo composto ser estabilizado no ambiente, e, assim, determinar seu potencial de biodegradação. Contudo, o tempo ou o coeficiente de degradação necessário para concluir que uma substância é biodegradável ou refratária são relativos, pois dependem também de fatores externos à sua composição. Existe inclusive a possibilidade de os organismos se adaptarem para decompor substâncias refratárias, porém esta situação dificilmente ocorre no ambiente devido às grandes variações das condições ambientais e em função da mobilidade da comunidade biótica. Esta adaptação geralmente é induzida em laboratório, onde as condições são passíveis de controle, com o propósito de aplicar o lodo rico em microrganismos ao tratamento de efluentes.

Se a matéria orgânica for utilizada como alimento em um intervalo de tempo relativamente curto, ela é considerada biodegradável, incluindo-se usualmente nesta categoria amidos, gorduras, proteínas, açúcares, álcoois, ácidos orgânicos, aldeídos e ésteres, que podem ocorrer na natureza como produtos da decomposição microbiana inicial de tecidos vegetais ou animais, assim como podem ter origem em fontes de poluição.

Os compostos orgânicos não biodegradáveis, referidos como refratários, inertes ou recalcitrantes, são aqueles resistentes à ação metabólica dos microrganismos naturais.

Ácidos tânicos e lignínicos, celulose e fenóis são freqüentemente encontrados em meios aquáticos naturais, por serem constituintes de madeiras. Eles são compostos que degradam tão lentamente que usualmente são considerados refratários. Moléculas com estruturas aromáticas (e.g. benzeno) ou com ligações químicas essencialmente fortes (e.g. alguns polissacarídeos) são essencialmente refratárias. Alguns compostos podem ter sua transformação catalisada por agentes físicos do ambiente como luz e temperatura, como acontece com hidrocarbonetos.

A temperatura tem grande influência para a velocidade do metabolismo de bactérias decompositoras de matéria orgânica, interferindo, conseqüentemente, nas concentrações de DBO e OD. Segundo Fair, citado em JORDÃO (1995), a redução da DBO₅ de primeiro estágio a 30°C chega a ser três vezes superior a esta redução para 5°C, que por sua vez representa 45% da DBO₅ a 20°C, temperatura que é usada como padrão para análises. Algumas espécies de microorganismos atuam somente em faixas estreitas de temperatura, enquanto outras têm capacidade de se adaptar melhor a variações maiores, desde que não ocorram bruscamente.

5.3 Nutrientes

Os nutrientes são substâncias indispensáveis à reprodução e crescimento de microorganismos, plantas e animais. Os elementos que são requeridos em maior abundância pelos seres vivos, compondo mais de 0,2 por cento do peso orgânico seco (p.o.s.), como Carbono, Fósforo (P) e Nitrogênio (N) são denominados macronutrientes, enquanto os micronutrientes participam em quantidades inferiores a 0,2% do p.o.s. do ser vivo e, portanto, são necessários em pequenas quantidades (traços) (BRAGA *et al.*, 2002).

A relação em peso de DBO:N:P é considerada como indicadora da capacidade de degradação da matéria orgânica no ambiente, sendo um parâmetro essencial para assegurar a viabilidade de tratamento biológico de águas residuárias. A relação 100:5:1 é usada como referência para manter um balanço adequado entre carga orgânica e nutrientes para o tratamento biológico. Nos esgotos domésticos é comum existir naturalmente esta proporção ideal, derivada da decomposição de alimentos e matéria

morta excretada por humanos. As concentrações típicas de fósforo e nitrogênio em esgotos domésticos, citadas por diversos autores, estão apresentadas na Tabela 4.

O nitrogênio e o fósforo podem influenciar no consumo de oxigênio diretamente, através da formação de compostos por oxidação, ou ter um efeito secundário, ao favorecer as condições para o crescimento da biomassa, incrementando a quantidade de carbono fixado, o que posteriormente aumenta drasticamente a demanda por oxigênio no meio aquático para sua decomposição.

Tabela 4: Valores Típicos de concentração de Nitrogênio e Fósforo em esgotos domésticos

Pesquisador	Fósforo Total (mg/l)	Nitrogênio NTK (mg/l)
THOMANN(1987)	10	50
RAST & LEE (1978)	10	50
METCALF (1981)	10	40
WEF (1991)	7	30
VON SPERLING (1996a)	14	50

Fósforo e nitrogênio são fatores limitantes do crescimento de produtores primários, pois nem sempre estão disponíveis na quantidade que as algas e vegetais aquáticos são capazes de assimilar. O primeiro limita o crescimento principalmente em lagos, e o segundo principalmente em estuários (JORDÃO, 1995). Quando existem em quantidades e proporções elevadas ocorre uma floração excessiva de algas, decorrente da eutrofização. Este fenômeno é indesejável, pois muitas vezes o corpo hídrico não tem capacidade de suportar este crescimento.

A disponibilidade destes nutrientes no meio aquático depende das características geoquímicas da bacia hidrográfica contribuinte, no caso de ser pouco antropizada, ou do uso do solo e atividades poluidoras existentes em bacias com maior ocupação urbana. Os padrões de circulação hidrodinâmica também são de grande relevância ao se avaliar a renovação da água, e o transporte e balanço dos nutrientes.

Os valores de P total podem ser utilizados como indicativos aproximados do estado de eutrofização de lagos (Tabela 5), sendo que lagos tropicais provavelmente aceitam concentrações superiores (VON SPERLING, 1996a).

Tabela 5: Estado de Eutrofização de lagos em função da concentração de Fósforo

Concentração de Fósforo (mg/l)	Estado de Eutrofização
---------------------------------------	-------------------------------

P<0,01
0,01 < P < 0,05
P>0,05

oligotrófico – transparente, baixa produtividade
mesotrófico – produtividade intermediária
eutrófico – alta produtividade

(FONTE: ADAPTADO DE VON SPERLING, 1996A)

5.3.1 Nitrogênio

O nitrogênio é o elemento predominante na atmosfera, representando 78% do total, em massa. No entanto, somente alguns tipos de bactérias, fungos e algas possuem a capacidade altamente especializada de assimilar diretamente o nitrogênio elementar (N₂) e convertê-lo de forma que possa ser utilizado por organismos superiores, que por sua vez fazem a síntese de proteínas e compostos orgânicos nitrogenados. As proteínas, que são componentes de todas as células vivas, contêm uma média de 16% de nitrogênio, em peso (HENRY&HEINKE, 1995).

No solo e na água, a ocorrência natural de compostos de nitrogênio é relativamente pequena, sendo que a principal contribuição é por meio da decomposição de plantas e animais mortos do próprio sistema ou de sistemas vizinhos, além do nitrogênio atmosférico fixado pelos microrganismos. Estes organismos fixadores de nitrogênio, ou seja, capazes de incorporar diretamente o nitrogênio atmosférico em sua estrutura, podem ser classificados em simbióticos ou livres. Os organismos simbióticos funcionam como fertilizantes naturais ao se associar a raízes de vegetais, estando confinados apenas a ecossistemas terrestres. Os organismos fixadores de nitrogênio não simbióticos podem ser aeróbios ou anaeróbios e são de vida livre, sendo encontrados tanto no solo quanto em habitats aquáticos (BUCHANAN, 2000). Outras fontes de contribuição de nitrogênio da atmosfera para a água, porém de menor importância, são por meio da chuva, que absorve os óxidos de nitrogênio decorrentes da poluição atmosférica e os compostos nitrogenados produzidos por conversões eletroquímicas em tempestades.

No modelo são incluídos os principais processos do ciclo do nitrogênio no meio aquático, mostrados na Figura 1.

Compostos de nitrogênio podem também ser oxidados por bactérias do solo até atingir a forma de nitrato, a principal forma de nutriente para ser aproveitado pelos produtores.

Contudo, por estarem em estado solúvel, os nitratos podem ser transportados livremente por percolação para aquíferos subterrâneos. Diferente de quando o nitrogênio está na forma do cátion amônio, pois ele tende a se adsorver na argila, que tem carga negativa, ficando retido no solo, ou, sendo transportado como sedimento pela água, pode se depositar nas zonas de recirculação, ou zonas mortas, onde normalmente se observam maiores concentrações de amônia.

No esgoto doméstico, os compostos nitrogenados estão presentes principalmente na forma de **nitrogênio orgânico**, notadamente proteínas, aminoácidos e uréia. Outras fontes de nitrogênio em sistemas aquáticos são os dejetos de animais, os fertilizantes utilizados na agricultura e efluentes industriais. O nitrogênio oriundo dessas fontes pode ser lançado diretamente nos corpos receptores ou pode entrar neles pelo escoamento superficial. As atividades industriais que mais contribuem para poluição com compostos nitrogenados são as indústrias de fumo, de alguns produtos farmacêuticos, de alguns produtos alimentícios e fábricas de desinfetantes. O chorume, líquido proveniente da decomposição dos resíduos sólidos orgânicos, é um exemplo de poluente com altíssimo teor de amônia, embora tenha uma contribuição em volume descartado nos corpos hídricos relativamente pequena em comparação com outros efluentes.

Durante seu ciclo de transformação os compostos nitrogenados complexos são reduzidos a moléculas menores por microrganismos até gerar amônia, em um processo denominado **amonificação**. Os compostos amoniacais podem estar na forma de **amônia molecular (NH₃)** ou na forma de **íon amônio (NH₄⁺)**, dependendo do pH do meio aquático, de acordo com a reação mostrada na Equação 6:



A distribuição relativa dos compostos amoniacais assume a seguinte forma em função dos valores de pH (Tabela 6). O aumento do pH e o aumento da temperatura contribuem para a elevação da fração não ionizada e redução da fração ionizada.

Tabela 6: Distribuição de compostos amoniacais em função do pH

pH	Estado
<8	Praticamente toda a amônia na forma de NH ₄ ⁺
9,5	Aproximadamente 50% NH ₄ ⁺ e 50% NH ₃
>11	Praticamente toda a amônia na forma de NH ₃

FONTE: VON SPERLING, 1996A

Alguns microrganismos, principalmente certas espécies de bactérias quimiossintéticas, são capazes de oxidar os compostos amoniacais, durante o processo de **nitrificação**. Através destas reações químicas estes seres obtêm energia para seu metabolismo. Numa primeira etapa as bactérias nitrificantes dos gêneros *Nitrosomonas*, *Nitrosolobus* e *Nitrosococcus* oxidam o nitrogênio amoniacal, formando **nitrito (NO₂⁻)** e diminuindo o pH, como mostra a Equação 7:



Nitrobacter, outro gênero de bactéria, oxida o nitrito, formando **nitrato (NO₃⁻)**, novamente com liberação de energia (Equação 8):



As bactérias do gênero *Nitrobacter* tem taxa de crescimento bem maior do que as bactérias *Nitrosomonas*, principais responsáveis pela primeira etapa da nitrificação. Isto propicia uma maior taxa de transformação de nitrito a nitrato do que a formação de nitritos, o que é uma das principais razões para a prevalência de nitratos no ambiente.

Na **desnitrificação** acontece a conversão do nitrato através das bactérias dos gêneros *Pseudomonas*, *Paracoccus*, *Thiobacillus*, transformando o nitrogênio até fazê-lo voltar ao seu estado livre, volatilizando para a atmosfera. A Equação 9 mostra o ciclo total, e a Equação 10 representa uma equação estequiométrica simplificada deste processo (VON SPERLING, 1996a).



Esta etapa é de especial importância para o tratamento de efluentes, quando as condições ideais nos reatores são controladas para as bactérias reduzirem o nitrato e, na sequência, acontecer a remoção do nitrogênio. No ambiente marinho, a desnitrificação é considerada o principal processo de remoção de nitrogênio (SEITZINGER, 1988) e está concentrada sobretudo nos estuários, devido ao grande aporte continental de nitrato (YEATS, 1990). Este processo proporciona economia de oxigênio e de alcalinidade do meio, liberando 2,86 mg O₂/l para cada 1 mg/l de N-NO₃ (VON SPERLING, 1997).

Segundo estudo da Agência Ambiental dos Estados Unidos (USEPA, 1975), a oxidação de 1g de nitrogênio amoniacal (NH₄⁺ e NH₃) a nitrato requer aproximadamente 4,57g de oxigênio. Os compostos nitrogenados na água residuária bruta representam 23,5 % da demanda total de oxigênio, e após o tratamento secundário a parcela que não é removida destes compostos chega a representar 71,3% desta demanda.

Se houver a presença das bactérias dos gêneros *Escherichia* e *Enterobacter*, o nitrato pode ser transformado até amônio, (BUCHANAN, 2000) voltando a ficar em seu estado mais reduzido (Equação 11):



Estas duas últimas etapas acontecem somente em pontos com concentrações de oxigênio extremamente baixas e dentro de uma faixa restrita de potencial redox, requisitos básicos para os microrganismos fazerem uso de nitrato como acceptor de elétrons durante a decomposição de matéria orgânica carbonácea. Assim, a camada de sedimentos do fundo possui condições para fixação dos decompositores devido à maior disponibilidade de matéria orgânica depositada e menores taxas de oxigênio, sendo este setor do meio aquático o mais ativo durante o processo de desnitrificação. Contudo, o SisBAHIA® considera a distribuição das substâncias homogênea na vertical, fazendo necessário simplificar as diferenças de atividade biológica ao longo da coluna d'água.

A cinética destes processos fornece informações importantes para identificar o estágio de poluição de corpos d'água. A presença de amônia e nitrogênio orgânico, compostos abundantes em esgoto bruto, indica poluição recente no corpo hídrico, enquanto a predominância de nitratos representa uma poluição mais antiga. Os nitritos estão em concentrações mais reduzidas, por serem instáveis e se oxidarem facilmente a nitrato. Quando todas estas espécies estão presentes, significa uma fase intermediária de

poluição ou um despejo contínuo associado a um baixo padrão de circulação da água do corpo receptor (pouca renovação).

As taxas de nitrificação, amonificação e outras que dependem de processos bioquímicos são fortemente influenciadas por mudanças nas condições ambientais, causando alterações também na quantidade de nitrogênio que os seres vivos do sistema são capazes de absorver durante seu ciclo de crescimento. Cada microrganismo possui uma faixa ótima de temperatura, salinidade e pH para se desenvolver, dentro das quais a capacidade de consumo de substâncias do meio aquático é maximizada.

A amônia e o nitrogênio orgânico são usualmente determinados em laboratório pelo método Kjeldahl, sendo possível se fazer a separação destas duas parcelas. Porém, para efeito de simplificação, tanto em modelagem ambiental quanto para o tratamento de esgotos se usa o Nitrogênio Total Kjeldahl – NTK, para representar o total de amônia, admitindo-se que o nitrogênio orgânico vá ser todo convertido a amônia durante o processo. De fato acontece esta conversão praticamente total em um intervalo de tempo relativamente curto (VON SPERLING, 1996a).

Os compostos nitrogenados podem significar risco direto a saúde humana e de outros organismos. A amônia, a partir de certos valores de concentração, é tóxica para a maioria das espécies de peixes. O nitrato causa a cianose, ou meta-hemoglobinemia, doença que acomete recém-nascidos, provocando descoloração de pele em consequência de alterações no sangue. O nitrito, embora relativamente instável, é extremamente tóxico para a maioria dos peixes e outras espécies aquáticas (VON SPERLING, 1996a).

5.3.2 Fósforo (P)

O fósforo é essencial para todos os organismos vivos, especialmente os produtores primários de matéria orgânica. Este elemento compõe moléculas como ácidos nucleicos e adenosina trifosfatos, envolvidos na síntese de enzimas e transferência de energia dos seres vivos. A proporção do fósforo em relação a outros elementos na composição de organismos vivos é consideravelmente maior do que esta proporção para sistemas

naturais (solo, água), indicando que o suprimento de fósforo é crítico para o crescimento biológico de produtores primários.

O fósforo é ainda mais escasso no ambiente aquático do que o nitrogênio, dado que a sua origem na natureza ocorre principalmente em rochas e no solo, geralmente na forma de compostos de fosfato com cálcio. Algumas espécies de bactérias são capazes de solubilizar estes compostos fosfatados inorgânicos, sendo a produção de ácido por estes microrganismos a principal causa da solubilização. Neste estado, o fósforo tanto pode ser carregado para corpos hídricos, superficiais ou subterrâneos, quanto pode ser absorvido por vegetais.

Devido à contribuição de fósforo lixiviado pelas chuvas e às mudanças sazonais de produção biológica, é possível observar uma significativa variação de concentração de fósforo em meios aquáticos ao longo do ano. RIGLER (1964) relatou níveis baixos de fósforo inorgânico ao longo do ano, com um aumento nas concentrações durante o inverno, devido ao menor consumo biológico.

A tendência à adsorção do fosfato em partículas de solo limita a sua mobilidade pelo próprio solo e pelas águas subterrâneas. Esta propriedade também contribui para que os fosfatos sejam removidos da água pelos sedimentos que se depositam nos corpos hídricos, especialmente durante a sua oxidação. Dependendo das condições físico-químicas da água pode acontecer a ressuspensão do fosfato do fundo, quando, em condições anóxicas, o fósforo passa à forma $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$, que é solúvel em água, ficando disponível para ser utilizado no processo fotossintético. Na presença de oxigênio, o fósforo se apresenta na forma de FePO_4 , que é insolúvel em água, e, portanto, fica depositado no fundo (RIGLER, 1964).

Como os limites adotados para o descarte de efluentes são genéricos, muitas vezes se constata um valor de *background* (existente no ambiente) superior ao da norma, que depende da composição geoquímica da bacia hidrológica. Em alguns casos não é necessário valores tão baixos para o lançamento, ao passo que outros locais podem demandar valores ainda mais restritivos. (VON SPERLING, 1997)

O fósforo está presente de variadas formas nas águas naturais, sendo quase sempre encontrado em estado completamente oxidado, ocorrendo na forma orgânica ou

inorgânica. Geralmente a concentração do fósforo orgânico é muitas vezes superior à de fósforo inorgânico, tanto em águas doces quanto em águas salgadas.

Os **ortofosfatos** são compostos de fósforo simples, podendo ser absorvidos diretamente por plantas, algas e bactérias, que convertem o PO_4^{3-} para a forma orgânica. Estes compostos se encontram solubilizados na água, nas seguintes formas: PO_4^{3-} , HPO_4^{2-} , H_2PO_4^- , H_3PO_4 , variando em função do pH do meio. Num esgoto doméstico típico, a forma predominante é o HPO_4^{2-} .

Os **polifosfatos** são moléculas mais complexas, contendo dois ou mais átomos de fósforo na sua estrutura. Outras espécies complexas de fósforo incluem o pirofosfato e os metafosfatos. Todos os polifosfatos ou fosfatos complexos se hidrolisam gradualmente quando em contato com a água, convertendo-se à forma orto, da qual todos são derivados. A taxa de conversão (ou de hidrólise) é função da temperatura e aumenta rapidamente quando esta se aproxima do ponto de ebulição, e aumentando também com a diminuição do pH. A hidrólise dos fosfatos complexos é incrementada pela ação das enzimas bacterianas, sendo a taxa de conversão muito mais lenta em águas limpas do que em águas residuárias. A conversão completa de polifosfatos a ortofosfato pode levar horas ou até dias, particularmente a baixas temperaturas e pHs elevados.

O **fósforo orgânico** particulado está presente no protoplasma de células, e se transforma em inorgânico pela sua decomposição ou por excreção. O fósforo orgânico é geralmente de menor importância nos esgotos domésticos típicos, mas pode ser importante em efluentes industriais e lodos oriundos do tratamento de esgotos. No tratamento de águas residuárias e nos corpos receptores, o fósforo orgânico é convertido a fosfatos. (VON SPERLING, 1996a)

As principais fontes de fósforo são de origem antrópica, como detergentes, fertilizantes, esgotos domésticos e despejos industriais, bem como excrementos de animais. Este aspecto possibilita um controle mais eficiente do que é emitido para o ambiente por meio da redução ou eliminação de seus compostos na produção, ou ainda, pelo tratamento de efluentes que contêm este elemento. Na Europa, já na década de 70, se percebeu os efeitos deletérios para os corpos hídricos do fósforo presente em detergentes, quando foram criadas leis para reduzir ou mesmo eliminar este elemento da

fórmula. O fósforo e seus compostos, contudo, não representam nenhum risco direto à saúde do homem ou de outros organismos, estando seus impactos ambientais restritos à eutrofização.

6 Cinética de Reações

Matéria Orgânica, Nitrogênio e Oxigênio são fortemente suscetíveis a transformação no ambiente, sofrendo aumento ou redução de concentração, através de reações diretas com outras substâncias químicas. Estas reações com outras substâncias podem ainda ser promovidas por mecanismos biológicos, sendo chamadas reações bioquímicas, representando a grande maioria das transformações que os compostos dos elementos citados sofrem. A velocidade com que ocorre a variação de concentração de substâncias no ambiente e a melhor formulação matemática para representar estes processos são fundamentais para uma modelagem ajustada. As reações que ocorrem com os elementos deste estudo são lentas, dependentes do tempo e das condições físico-químicas do meio onde acontecem.

As reações que ocorrem em uma única fase são chamadas homogêneas, já as que ocorrem nas superfícies entre duas fases (sólido-água, ar-água), são denominadas heterogêneas. Há outras classificações para os sistemas homogêneo e heterogêneo, inclusive algumas em que catalisadores afetam a taxa de reação, o que de fato acontece em alguns fenômenos aqui estudados; as reações homogêneas são mais comuns, e são, portanto, enfatizadas.

Equações de velocidade de reação ou equações cinéticas mostram a variação na concentração de uma espécie molecular em relação ao tempo como uma função matemática da constante da reação ou constante cinética, especificada por k , e a concentração de cada espécie molecular que participa da reação. Para a equação estequiométrica (12):



onde a , b , c são coeficientes estequiométricos da equação para os reagentes A e B , e o produto C . A taxa da reação (r) é dada por:

$$r = -k [A]^x [B]^y = k[C]^z \quad (13)$$

onde $[A]$, $[B]$, $[C]$ são as respectivas concentrações dos reagentes; x , y , z são expoentes calculados empiricamente e k é a constante da reação. O sinal negativo indica que A e B estão desaparecendo enquanto C está aumentando. A **ordem global da reação** é definida pela soma dos expoentes x e y , enquanto a ordem com relação ao reagente A é x , com relação ao reagente B é y , e em relação ao produto C é z . Na maioria dos casos os expoentes são números inteiros, mas também são encontrados experimentalmente expoentes fracionários.

Reação de ordem zero significa que a velocidade da reação não varia em função da concentração das espécies presentes, tendo uma taxa de variação constante ao longo do tempo. Não existem reações bioquímicas que sejam totalmente de ordem zero, no entanto, nos casos em que não há fatores limitantes para o desenvolvimento das reações elas tendem a seguir este padrão de formulação matemática, mostrada na figura 7.

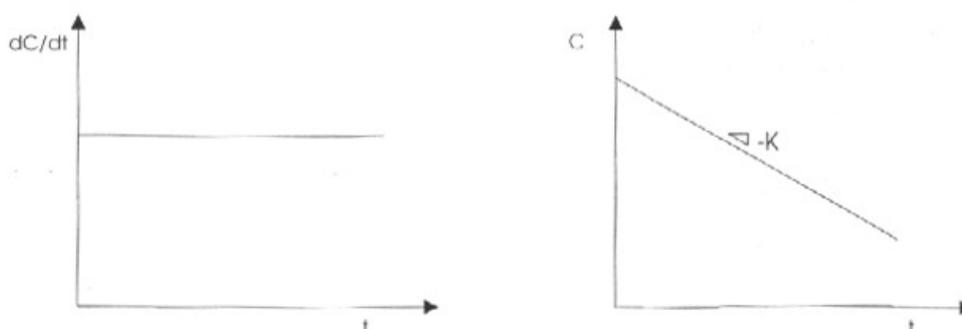


Figura 6: Reação de ordem zero: variação da taxa dC/dt com o tempo e variação da concentração com o tempo (VON SPERLING, 1996b)

Na **reação de primeira ordem**, mostrada na Figura 8, a taxa depende de um único reagente elevado à primeira potência. A remoção de matéria orgânica e o decaimento de microrganismos são exemplos de reações que seguem esta cinética. Segundo ARCEIVALA (1981), embora vários componentes estejam envolvidos, como a concentração de oxigênio, o número de microrganismos e a concentração da matéria orgânica e nutrientes, a taxa pode ser proporcional à concentração de um único composto (matéria orgânica ou nutrientes, no caso), desde que os outros estejam em abundância relativa.

Há vários processos complexos em que a taxa global se processa segundo uma cinética de primeira ordem. Várias substâncias podem individualmente exibir uma cinética de ordem zero, mas os substratos complexos, em que diversas dessas substâncias encontram-se agregadas (ex. despejos domésticos e industriais), podem sofrer uma taxa de degradação que se dá segundo uma reação de primeira ordem. Inicialmente, quando a maioria dos componentes está sendo removida (consumida) simultaneamente, a taxa global de remoção é elevada. Após um certo tempo, no entanto, a taxa pode ser mais lenta, quando apenas os compostos de degradação mais difícil estão ainda presentes. Assim, a taxa global de reação assemelha-se a uma típica reação de primeira ordem. (ARCEIVALA, 1981)

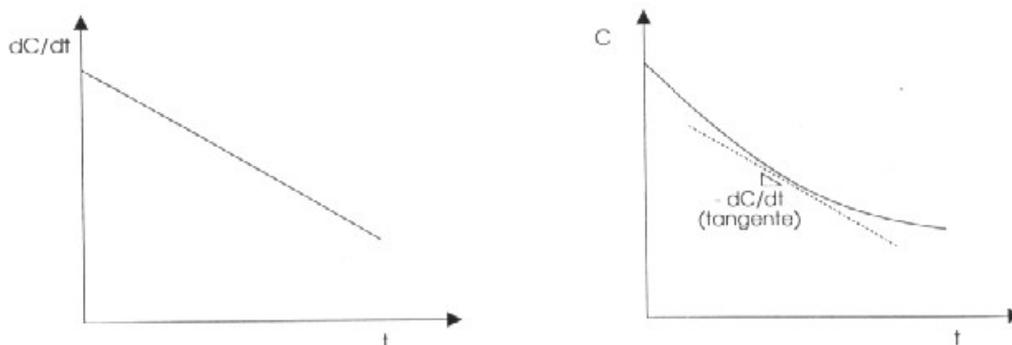


Figura 7: Reação de primeira ordem: variação da taxa dC/dt com o tempo e variação da concentração com o tempo (VON SPERLING, 1996b)

A **reação de saturação**, mostrada na Figura 9, é uma outra expressão cinética para descrever as taxas envolvidas na modelagem ambiental e baseia-se nas reações enzimáticas, cuja cinética foi proposta por Michaelis e Menten (VON SPERLING, 1996b). Como a decomposição bacteriana envolve uma série de relações catalisadas por enzimas, a expressão pode ser ampliada para descrever a cinética do crescimento bacteriano e as reações de decomposição de compostos orgânicos. (SAWYER, 1978)

Sem entrar em detalhes sobre reações enzimáticas, apresenta-se diretamente a equação da taxa de reação de saturação, que serve para substratos e nutrientes. Esta segue uma forma hiperbólica, onde a taxa tende ao valor de saturação, que é dada pela Equação 14:

$$r = r_{\max} \frac{S}{K_s + S} \quad (14)$$

onde:

r = a taxa da reação [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$]

r_{\max} = taxa máxima da reação [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$]

S = concentração do substrato/nutriente limitante [ML^{-3}]

K_s = constante de saturação [ML^{-3}]

Pela Equação 12, observa-se que, quando a concentração do substrato é igual a K_s , a taxa de reação r é igual a $r_{\max}/2$.

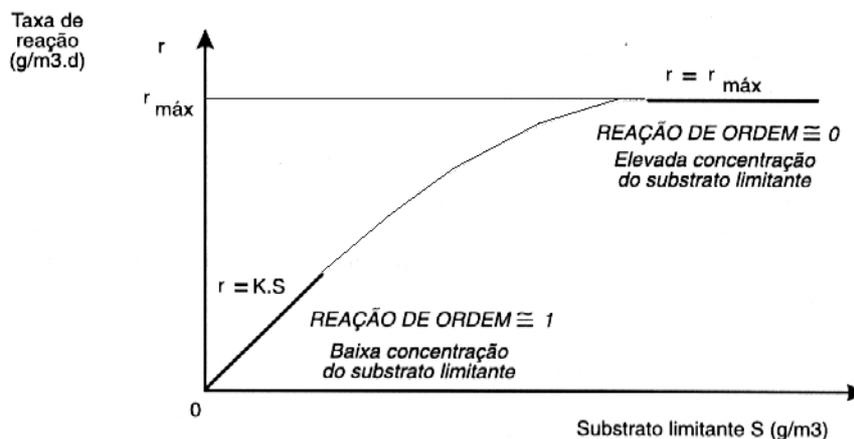


Figura 8: Cinética de Michaelis-Menten. Duas condições extremas na reação de saturação

A Equação 14 é amplamente utilizada na modelagem ambiental, tanto para substratos quanto para nutrientes. Até mesmo a cinética de crescimento bacteriano pode ser calculada por uma equação com este padrão, a chamada equação de Monod (FAIR, 1981). Sua grande importância reside na sua forma, que pode representar tanto as cinéticas de ordem zero quanto as de primeira ordem, bem como a transição entre as mesmas. Como comentado anteriormente, no início de uma reação de decomposição do substrato (matéria orgânica), quando a sua concentração é ainda elevada, não há limitação no meio, e a taxa de remoção global aproxima-se da cinética de ordem zero. À medida que o substrato passa a ser consumido, a taxa de reação principia a decrescer, caracterizando uma região de transição, ou de ordem mista. Quando a concentração de substrato passa a ser bem baixa, a taxa de reação passa a ser limitada pela sua pouca disponibilidade no meio. Nestas condições, a cinética ocorre como em primeira ordem.

Estas duas situações, em função dos valores relativos de S e K_s , são descritas a seguir (VON SPERLING, 1996b)

- **Considerando a relação entre substrato e nutriente elevada:**

$S \gg K_s$: reação aproximadamente de ordem zero

Quando a concentração de substrato é muito maior do que K_s , K_s pode ser desprezado no denominador da Equação 14. Assim, esta se reduz a:

$$r = r_{\max} \quad (15)$$

Nestas condições, a taxa de reação r é constante e igual a taxa máxima r_{\max} . A reação segue uma cinética de ordem zero, em que a taxa de reação é independente da concentração de substrato. No ambiente, esta situação tende a ocorrer na zona de influência de despejos, onde a concentração de substratos ainda é elevada, e em lagos eutrofizados, com grande disponibilidade de nutrientes.

- **Considerando a relação entre substrato e nutriente baixa:**

$S \ll K_s$: reação aproximadamente de primeira ordem

Quando a concentração de substrato/nutriente é muito menor do que o valor de K_s , S pode ser desprezado no denominador da Equação 14. Em consequência, esta se reduz a:

$$r = r_{\max} \frac{S}{K_s} \quad (16)$$

Como r_{\max} e K_s são constantes, o termo (r_{\max} / K_s) é também uma constante, podendo ser substituído por uma nova constante K . Desta forma, a Equação 14 se reduz a:

$$r = K \cdot S \quad (17)$$

6.1 *Influência da Temperatura*

A taxa de qualquer reação química aumenta com a elevação da **temperatura**, desde que a elevação da temperatura não produza alterações nos reagentes ou no catalisador. As reações biológicas apresentam a mesma tendência de acréscimo com a temperatura. No entanto, para estas últimas existe uma temperatura ótima, acima da qual há um decréscimo da taxa, possivelmente devido à destruição de enzimas nas temperaturas mais elevadas (SAWYER, 1978)

Uma forma usual de estimar a variação da taxa de reação em função da temperatura é através da formulação baseada na teoria de Van't Hoff-Arrhenius, expressa na equação (VON SPERLING, 1996b):

$$\frac{K_{T_2}}{K_{T_1}} = \theta^{T_2-T_1} \quad (18)$$

onde

K_{T_2} = constante de reação para a temperatura 2

K_{T_1} = constante de reação para a temperatura 1

θ = coeficiente de temperatura

T = temperatura (°C)

As reações cinéticas de oxigênio, nitrogênio e DBO que compõem o modelo também sofrem alterações significativas em função da **salinidade**, mas como o estudo de caso aqui apresentado aborda somente água doce, não cabe nesta dissertação um detalhamento da influência deste parâmetro.

6.2 *Equações do Modelo de Qualidade d'água*

Todos estes processos físicos, químicos e biológicos que envolvem perda ou ganho de oxigênio no sistema são descritos isoladamente e formulados matematicamente para comporem o balanço de cada parâmetro apresentado nas equações de Oxigênio Dissolvido, Demanda Bioquímica de Oxigênio, Nitrogênio-Amônia e Nitrogênio-Nitrato, apresentadas nos itens a seguir.

Demanda Bioquímica de Oxigênio (C_5)

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_5}{\partial t} = & a_{oc} K_{1D} C_4 - K_D \Theta_D^{(T-20)} \left(\frac{C_6}{K_{DBO} + C_6} \right) C_5 - \frac{V_{s3}(1-f_{D5})}{H} C_5 \\ & - \frac{5}{4} \frac{32}{14} K_{2D} \Theta_{2D}^{(T-20)} \left(\frac{K_{NO3}}{K_{NO3} + C_6} \right) C_2 \end{aligned} \quad (18)$$

onde: a_{oc} : relação carbono-oxigênio (mg O₂/ mg C),
 K_{1D} : coeficiente de decaimento do fitoplâncton (/dia),
 C_4 : concentração de biomassa de fitoplâncton (mg/l),
 K_D : coeficiente de desoxigenação em 20°C (/dia),
 Θ_D : coeficiente de temperatura para a desoxigenação,
 C_6 : concentração de oxigênio dissolvido (mg/l),
 K_{DBO} : metade da constante de saturação para oxidação da DBO (mg O₂/L),
 V_{s3} : velocidade de deposição de substância orgânica (m/dia),
 f_{D5} : fração de DBO dissolvido na coluna d'água,
 K_{2D} : coeficiente de desnitrificação em 20°C (/dia),
 Θ_{2D} : coeficiente de temperatura para desnitrificação,
 K_{NO3} : metade da constante de saturação para OD(mg N/L),
 C_2 : concentração de nitrato (mg/l),

Oxigênio Dissolvido(C_6) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_6}{\partial t} = & K_a \Theta_a^{(T-20)} (C_s - C_6) - K_D \Theta_D^{(T-20)} \left(\frac{C_6}{K_{DBO} + C_6} \right) C_5 - \frac{64}{14} K_{12} \Theta_{12}^{(T-20)} \left(\frac{C_6}{K_{NIT} + C_6} \right) C_1 \\ & + G_{PI} \left(\frac{32}{12} + \frac{48}{14} \frac{14}{12} (1 - P_{NH3}) \right) C_4 - \frac{32}{12} K_{1R} \Theta_{1R}^{(T-20)} C_4 \end{aligned} \quad (20)$$

onde: K_a : coeficiente de reaeração em 20°C (/dia),
 Θ_a : coeficiente de temperatura para a reaeração,
 C_s : concentração de saturação do oxigênio
 K_{12} : coeficiente de nitrificação em 20°C (/dia),
 Θ_{12} : coeficiente de temperatura para a nitrificação,
 K_{NIT} : metade da constante de saturação para OD limitado pelo processo de nitrificação (mg O₂/L),
 C_1 : concentração de amônia (mg/l),
 C_{6j} : fração da concentração de OD na coluna de sedimento (mg/l),
 Θ_s : coeficiente de temperatura de OD para as trocas difusivas,
 G_{PI} : taxa de crescimento (/dia),
 P_{NH3} : termo de referência da amônia,
 C_4 : concentração de biomassa de fitoplâncton (mg/l),
 K_{1R} : coeficiente de respiração do fitoplâncton endógeno em 20°C (/dia) e
 Θ_{1R} : coeficiente de temperatura para a respiração do fitoplâncton endógeno.

Amônia (C₁):

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = D_{PI} \Theta_{Dpi}^{T-20} (1 - f_{on}) C_4 - G_{PI} P_{NH3} C_4 - K_{12} \Theta_{12}^{T-20} \left(\frac{C_6}{K_{NIT} + C_6} \right) C_1 \quad (19)$$

onde : D_{PI} : coeficiente de decaimento do fitoplâncton em 20°C (/dia),
 Θ_{Dpi} : coeficiente de temperatura para o decaimento do fitoplâncton e
 f_{on} : fração de morte e respiração do fitoplâncton (/dia).

Nitrato (C₂):

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = K_{12} \Theta_{12}^{T-20} \left(\frac{C_6}{K_{NIT} + C_6} \right) C_1 - K_{2D} \Theta_{2D}^{T-20} \left(\frac{K_{NO3}}{K_{NO3} + C_6} \right) C_2 - G_{PI} (1 - P_{NH3}) C_4 \quad (202)$$

A seguir são apresentadas as equações envolvendo fósforo, que estão em fase de implementação na versão mais recente do modelo. Ressalte-se que estas equações não foram utilizadas para obter os resultados apresentados neste trabalho.

Fósforo Inorgânico (C₃):

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} = D_{PI} a_{pc} \Theta_{Dpi}^{T-20} (1 - f_{op}) C_4 + K_{83} \Theta_{83}^{T-20} \left(\frac{C_4}{K_{mPc} + C_4} \right) C_8 - G_{PI} a_{pc} C_4 \quad (23)$$

Fósforo Orgânico (C₈)

$$\frac{\partial C_8}{\partial t} = D_{PI} a_{pc} \Theta_{Dpi}^{T-20} f_{op} C_4 - K_{83} \Theta_{83}^{T-20} \left(\frac{C_4}{K_{mPc} + C_4} \right) C_8 - \frac{V_{s3} (1 - f_{D8})}{H} C_8 \quad (24)$$

onde: K_{mPc} : metade da constante para mineralização do fitoplâncton

K_{83} : coeficiente de mineralização do fósforo orgânico

Θ_{83} : coeficiente de temperatura para a mineralização do fósforo orgânico

7 Resultados e Discussão

7.1 Aspectos Gerais das Simulações

Considerando que o interesse deste estudo é analisar os processos de transformação pelos quais as substâncias passam, foi criado um ambiente para as simulações, cuja hidrodinâmica é bastante simples. O canal estudado possui 68.400 m de comprimento por 30 m de largura e profundidade variável, que são divididos em 114 elementos e 575 nós, igualmente espaçados com $\Delta x=600\text{m}$ e $\Delta y=15\text{m}$, caracterizando um escoamento unidimensional. As malhas, que representam fisicamente em três dimensões os ambientes modelados, apresentam profundidades de 4m e de 20m, sendo a única medida hidrogeométrica que é variada. O escoamento é permanente e uniforme, permitindo verificar a coerência entre as condições de contorno hidrodinâmicas introduzidas no modelo através da fórmula empírica de Chezy para canais abertos.

Os parâmetros hidrodinâmicos são sempre mantidos constantes. A velocidade média do fluxo, U , é mantida sempre constante em 0,3 m/s. O coeficiente de dispersão turbulenta no eixo longitudinal é mantido constante em $4 \text{ m}^2/\text{s}$. A dispersão transversal não é considerada neste estudo, que só leva em conta a variação de concentração na direção longitudinal. Os valores usados para a filtragem e para a interface dissipativa são os mesmos que já são predefinidos na configuração padrão do modelo. O número de *Péclet*, que é definido pela razão entre o balanço dos fluxos advectivo e difusivo de massa é mantido sempre em 50 (ROSMAN, 2001).

O modelo de qualidade d'água do SisBAHIA® permite várias opções de soluções. A mais geral destas opções é a simulação de todas as substâncias durante um intervalo de tempo, ou seja, o modelo resolve todas as substâncias de forma integrada. Outra opção é resolver apenas o ciclo do nitrogênio. Neste caso, os valores de temperatura, da concentração de sal, da concentração de DBO e da concentração de OD não se modificam ao longo da simulação, mantendo seus valores iniciais. A terceira opção é resolver apenas o ciclo do oxigênio, ou seja, um modelo OD-DBO. Neste caso, os valores de temperatura, da concentração de sal, da concentração de nitrogênio amônia, da concentração de nitrogênio nitrato, e da concentração de biomassa não se modificam ao longo da simulação, mantendo seus valores iniciais. Finalmente, pode-se resolver apenas a temperatura e o sal. Neste caso, os valores da concentração de nitrogênio-

amônia, da concentração de nitrogênio-nitrato, da concentração de biomassa, da concentração de OD e da concentração de DBO não são calculados pelo modelo (CUNHA *et al*, 2003, 2003). Nas simulações apresentadas aqui, é empregada a opção que envolve a solução com todas as substâncias.

As equações diferenciais e integrais que definem os processos naturais são resolvidas através de métodos numéricos. O tempo para obter os resultados depende da velocidade do computador utilizado, do nível de detalhamento, nível de discretização e intervalo de cada passo de tempo utilizado. Este último item é crucial para o tempo total de simulação e para a precisão dos resultados, pois é o tempo de referência para o modelo realizar as rotinas de cálculo.

A principal vantagem da modelagem computacional é o resultado rápido para antever as conseqüências dos processos que ocorrem no ambiente, a partir das condições iniciais inseridas. Nos casos simulados nesta pesquisa, para o processador computacional utilizado, o modelo hidrodinâmico atingiu um ganho de tempo da ordem de 190 vezes o período de tempo real em que aconteceria este mesmo fluxo hidrodinâmico no corpo hídrico, que seria medido através de instrumentos. O lapso temporal para executar a simulação do modelo de qualidade d'água foi aproximadamente 1.400 vezes inferior ao período de tempo em que ocorreria no ambiente a mesma dispersão com as reações e os parâmetros avaliados.

7.2 Caso analítico

Os resultados numéricos são comparados com a solução analítica de Streeter-Phelps (1925), apresentados em Thomann&Muller (1987), cujas formulações para o transporte de OD e DBO são apresentadas nas Equações 25 e 26, respectivamente. Para esta solução as condições iniciais dos parâmetros químicos ao longo do rio são consideradas nulas, sendo inseridas apenas as concentrações de OD e DBO na fronteira de montante. O resultado obtido (Figura 16) considera um intervalo de tempo suficiente para estas substâncias se espalharem e estabilizarem no ambiente, considerando que a solução analítica foi definida para escoamento permanente.

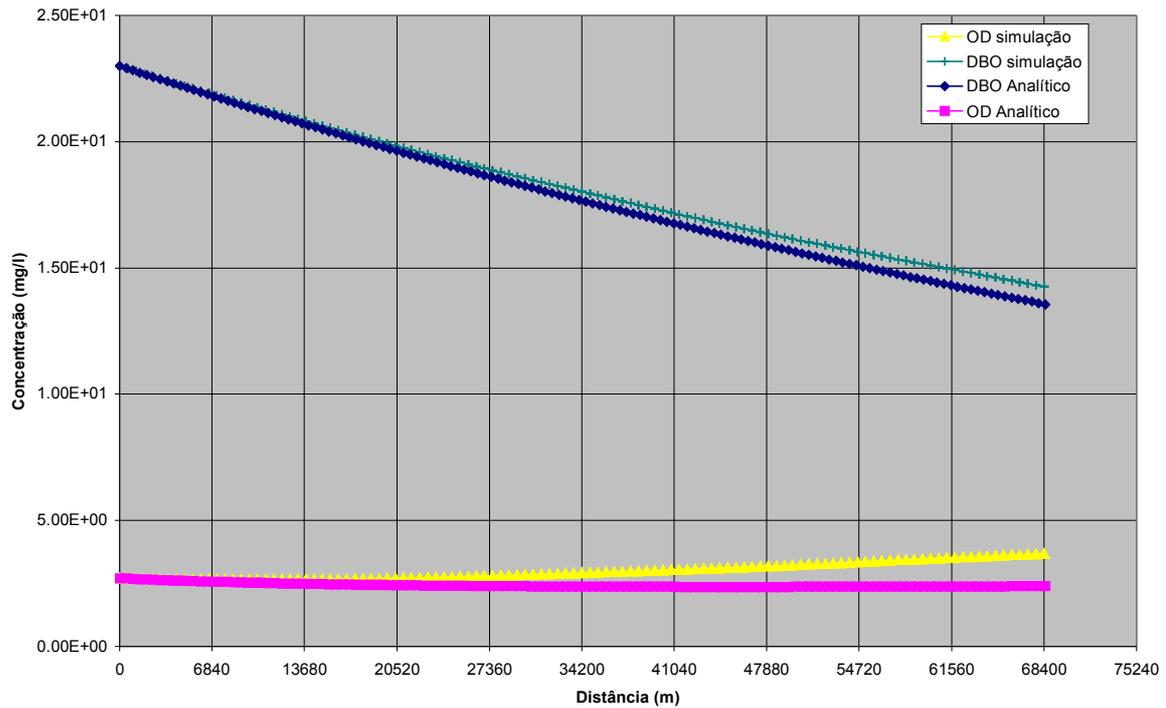


Figura 9: Comparação entre solução analítica e solução numérica obtida do modelo

As curvas mostram um bom ajuste entre os resultados das duas soluções. As pequenas diferenças constatadas no final da extensão analisada se devem às simplificações impostas na solução analítica, que desconsideram alguns termos e coeficientes componentes das equações do modelo. Desta forma, para rios canais que apresentam regularidade hidráulica e geométrica que possibilitam considerar o escoamento permanente, o SisBAHIA produz resultados condizentes com a consagrada solução analítica de Streeter-Phelps.

$$\begin{aligned}
 C_5(x,t) &= C_{5,0} \exp\left[\frac{U}{2E_x}(1 + \alpha_r)x\right] && \text{para } x \leq 0 \\
 C_5(x,t) &= C_{5,0} \exp\left[\frac{U}{2E_x}(1 - \alpha_r)x\right] && \text{para } x > 0
 \end{aligned}
 \tag{25}$$

Onde:

$$\alpha_r = \sqrt{1 + \frac{4K_r E_x}{U^2}}$$

$$\begin{array}{l}
 C_6(x,t) = C_{6,0} \frac{K_D}{K_a - K_r} \left\{ \frac{\exp\left[\frac{U}{2E_x}(1+\alpha_r)x\right]}{\alpha_r} - \frac{\exp\left[\frac{U}{2E_x}(1+\alpha_a)x\right]}{\alpha_a} \right\} \quad \text{para } x \leq 0 \\
 C_6(x,t) = C_{6,0} \frac{K_D}{K_a - K_r} \left\{ \frac{\exp\left[\frac{U}{2E_x}(1-\alpha_r)x\right]}{\alpha_r} - \frac{\exp\left[\frac{U}{2E_x}(1-\alpha_a)x\right]}{\alpha_a} \right\} \quad \text{para } x > 0
 \end{array} \quad (26)$$

Os valores dos coeficientes e variáveis utilizados nas equações constam na Tabela 9.

7.3 Cenários Simulados

O método utilizado para comparar e avaliar consiste em manter as mesmas condições iniciais, alterando uma variável por vez para verificar a sua influência nos resultados, que são apresentados através de gráficos. Em alguns casos, é possível identificar ajustes a serem feitos apenas comparando os resultados com conceitos e dados referenciados na literatura, sem necessitar testar diferentes valores para as variáveis envolvidas nas reações cinéticas.

Tabela 7: Condições iniciais para toda a extensão do canal

Concentração de sal: $C_s = 0,0$ mg/l
Temperatura: $C_T = 20,0^\circ\text{C}$
Concentração de Amônia: $C_1 = 1,5$ mg/l
Concentração de Nitrato: $C_2 = 0,5$ mg/l
Concentração de biomassa de fitoplâncton: $C_4 = 0,0$ mg/l
Concentração de DBO: $C_5 = 6,1$ mg/l
Concentração de OD: $C_6 = 2,7$ mg/l

Nas simulações é necessário determinar as condições iniciais do corpo receptor, inserindo valores para os parâmetros físicos químicos e biológicos. Para toda a extensão do canal são estabelecidos valores iniciais de concentração para as substâncias simuladas e temperatura, mostrados na Tabela 7, mantidos constantes para os vários cenários, com alterações somente para avaliar o efeito do nitrogênio no consumo de OD. A salinidade é nula, considerando que o ambiente é água doce. As concentrações

iniciais aqui utilizadas foram adaptadas das análises realizadas para o rio Juqueri, apresentadas em CETESB (1985), que caracterizam uma típica região antropizada.

Ao longo de cada simulação, um efluente é continuamente lançado na fronteira de montante, sendo uniformemente distribuído ao longo da seção transversal. As condições de contorno inseridas no modelo para as simulações, mencionadas na Tabela 8, são as concentrações resultantes da mistura imediata deste efluente no canal. Para atingir a concentração inserida nas simulações, seria necessário lançar uma vazão de esgoto doméstico correspondente a aproximadamente 7% da vazão do canal.

Tabela 8: Condições de contorno na fronteira de terra de montante, constantes ao longo do tempo

Amônia: $C1(0,t) = 5,0 \text{ mg/l}$

Nitrato: $C2(0,t) = 0,0 \text{ mg/l}$

DBO: $C5(0,t) = 23,0 \text{ mg/l}$

OD: $C6(0,t) = 2,7 \text{ mg/l}$

Os resultados gerados pelo modelo são os valores de concentração das substâncias (C) ao longo do eixo longitudinal (x) para determinado tempo (t), sendo que x é a distância na direção do fluxo, em metros, a partir da fronteira de terra de montante e t varia de 0 a 345.600s (4 dias), que é um período suficiente para uma substância introduzida em $x=0$ ser transportada até o final do canal. Ressalte-se que este transporte se dá em velocidade diferente do fluxo hidrodinâmico, que leva menos de três dias para percorrer toda a extensão do canal.

Os parâmetros que foram variados para se realizar as comparações são as taxas de transformação, como coeficientes de reaeração, velocidade de sedimentação e temperatura. Os valores para estes coeficientes e para outros que não são alterados são mostrados na Tabela 9. São testados alguns processos de grande representatividade, segundo a literatura. Os processos envolvendo compostos nitrogenados, amônia e nitrato, são avaliados simplesmente em função de seus padrões gráficos, independente de taxas de conversão. Para processos como reaeração e velocidade de transformação, onde a altura de coluna d'água interfere significativamente, são feitas simulações em malhas de 4 m e 20 m de profundidade, enquanto para os outros cenários é utilizada apenas a malha com a profundidade de 4 m. As medidas de profundidade são bem distantes, especialmente por se tratar de um canal, a fim de buscar um contraste considerável nos resultados.

Tabela 9: Parâmetros usados na simulação numérica do lançamento de efluente de esgoto doméstico em um rio.

Notação	Valor	Unidade
U	0,3	m/s
D_{xx}	4,0	m ² /s
K_{ID}	0,1	/dia
K_D	0,38	/dia
K_{DBO}	0,001	mg O ₂ /L
V_{S3}	0,0	m/dia
K_{2D}	0,09	/dia
K_{NO3}	0,1	mg N/L
K_a	1,2517	/dia
K_{I2}	0,22	/dia
K_{NIT}	0,2	mg N/L
G_{PI}	3,63	/dia
K_{IR}	0,16	/dia
f_{on}	0,50	/dia
D_{PI}	0,16	/dia
V_{s4}	0,05	m/dia

7.3.1 Zonas de autodepuração

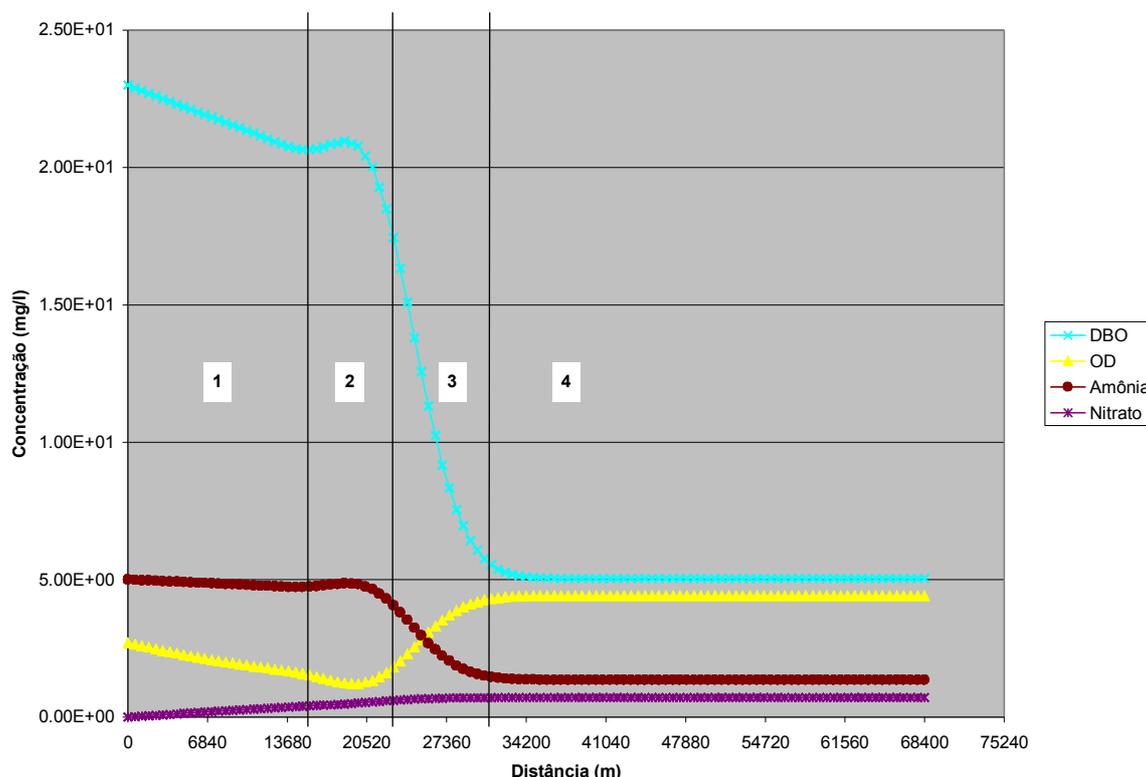


Figura 10: Variações de concentração de DBO, OD, Amônia e Nitrato e delimitação das zonas de autodepuração, sendo: 1) Zona de degradação; 2) Zona de decomposição ativa; 3) Zona de recuperação; 4) Zona de águas limpas

A Figura 10 mostra curvas de variações de concentração OD, DBO, Amônia e Nitrato, em função das quais o canal pode ser dividido em quatro zonas de autodepuração, a seguir descritas (VON SPERLING, 1996a):

1. **Zona de degradação** – Nesta zona há uma completa desordem, em relação à comunidade estável antes existente. O processo de decomposição da matéria orgânica, efetuado pelos organismos decompositores, pode ter um início lento, dependendo da adaptação dos seres aos despejos. O consumo inicial de oxigênio conseqüentemente é pequeno. Os compostos nitrogenados orgânicos apresentam-se em altos teores, embora já ocorra a conversão de boa parte dos mesmos a amônia. Os resultados, entretanto, não mostram este período de latência, devido à formulação matemática utilizada, que realiza as transformações desde o instante inicial.
2. **Zona de decomposição ativa** – Nesta zona o oxigênio dissolvido atinge sua menor concentração. Dependendo da concentração de matéria orgânica, o oxigênio pode

ser totalmente consumido pelos microrganismos, o que não é o caso desta simulação. O nitrogênio apresenta-se ainda na forma orgânica, embora a maior parte já se encontre na forma de amônia. No final da zona, já com a elevação do nível de oxigênio dissolvido, pode se principiar a oxidação da amônia a nitrito em pequenas proporções.

3. **Zona de recuperação** – A matéria orgânica, intensamente consumida nas zonas anteriores, já se encontra grandemente estabilizada, ou seja, transformada em compostos inertes. Isto implica que o consumo de oxigênio pela respiração bacteriana, seja mais reduzido. Com isso, a introdução de oxigênio atmosférico na massa líquida passa a superar o consumo de oxigênio para estabilização da matéria orgânica. As condições anaeróbias possivelmente preponderantes na zona anterior não mais ocorrem. A amônia é convertida em nitritos e estes a nitratos.
4. **Zona de águas limpas** – Na massa líquida há a predominância das formas completamente oxidadas e estáveis dos compostos minerais, embora o lodo de fundo não esteja necessariamente estabilizado. A concentração de oxigênio se eleva e tende a estabilizar, devido ao baixo consumo pela população microbiana.

7.3.2 Processo de nitrificação

A Figura 10 mostra que a oxidação da amônia em nitrato começa a acontecer logo no início da simulação. De fato esta conversão acontece imediatamente, porém o seu valor é quase imperceptível, pois os organismos nitrificantes ainda não estão em número proporcional à concentração de amônia. A taxa de crescimento destes organismos é mais lenta do que aqueles que consomem a matéria carbonácea, visto que apresentam um período temporal mais longo para a fase de retardo. Um ambiente com baixa circulação hidrodinâmica e sujeito a descargas constantes de esgoto, pode apresentar uma taxa de degradação mais elevada, devido ao fato dos seres ali presentes estarem em maior número e mais adaptados às condições ambientais que influenciam este processo. Por outro lado, em um rio com fluxo constante e sem regiões de zona morta, os microrganismos nitrificantes são varridos do sistema antes de chegar à fase de crescimento logarítmico.

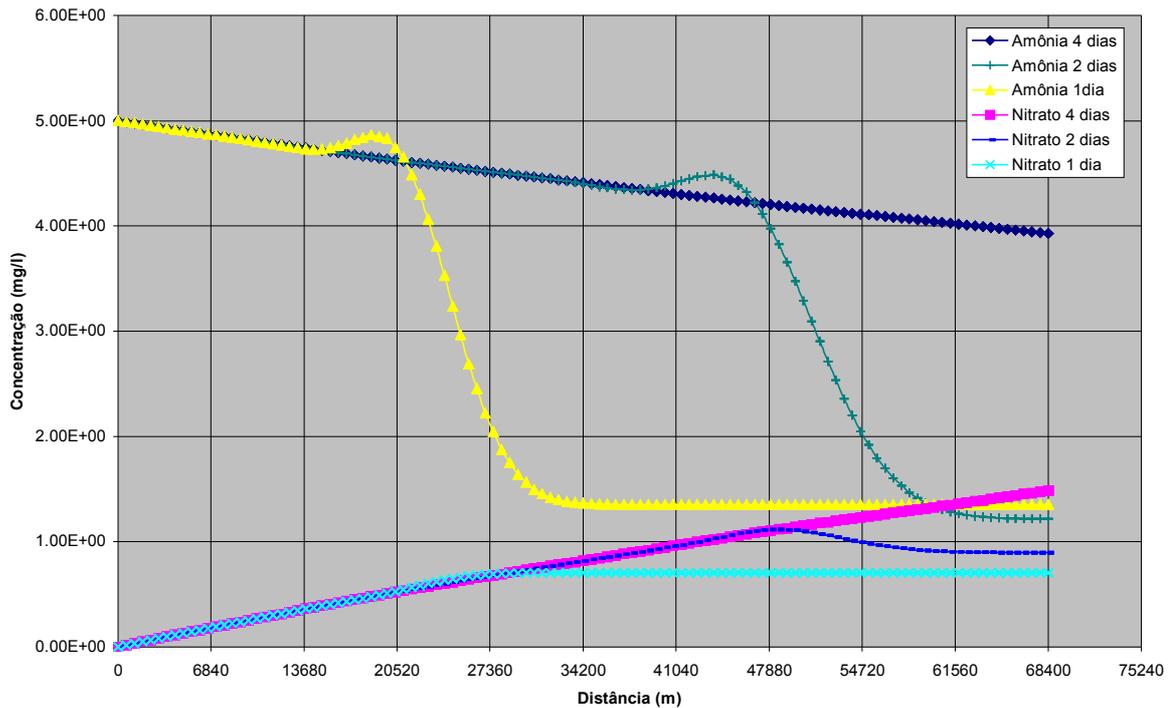


Figura 11: Nitrificação ao longo da extensão do canal, para os tempos de simulação de 1, 2 e 4 dias

Para a correta representação numérica do processo de nitrificação, seria necessário identificar a idade de cada carga poluidora e associar ao crescimento populacional bacteriano e sua dinâmica espacial. Só seria possível obter este nível de precisão na obtenção dos dados de entrada para o desenvolvimento de pesquisas específicas, sendo que não foi encontrado nenhum estudo sobre este assunto. Para efeitos práticos, no modelo é feita uma simplificação na equação, de modo que não considera o processo de amonificação e o atraso na conversão de amônia em nitrato.

Os processos que envolvem amônia e nitrato consideram variáveis biológicas e coeficientes cinéticos de reação. Estes dados poderiam ser testados e comparados para diferentes valores, porém, alguns ajustes nas equações do modelo podem ser apontados mesmo sem comparar tais variações. Na Figura 11, se observam duas elevações de concentração para as curvas de amônia de 1 dia e 2 dias, representando o transporte da carga lançada na fronteira de montante. A partir deste ponto há uma queda da concentração, que no gráfico se apresenta suavizada devido ao efeito da difusão, até os valores impostos como condição inicial ao longo do canal. À medida que a concentração de amônia se reduz, a concentração de nitrato se eleva até estabilizar em um valor, mantendo-se constante em todo o trecho restante do canal. A tendência natural seria que as duas curvas se cruzassem, pois o nitrogênio da amônia se

converteria em nitrato. O que poderia explicar este padrão gráfico do resultado seria uma limitação da atividade bacteriana por falta de amônia ou de oxigênio, o que não é o caso aqui, pois a concentração de OD chega no mínimo a 0,8 mg/l, sendo que a concentração crítica de OD, abaixo da qual este processo não acontece, é de 0,2 mg/l (BARNES & BLISS, 1983). O modelo não possui esta limitação mínima de OD para que o processo de nitrificação possa ser realizado.

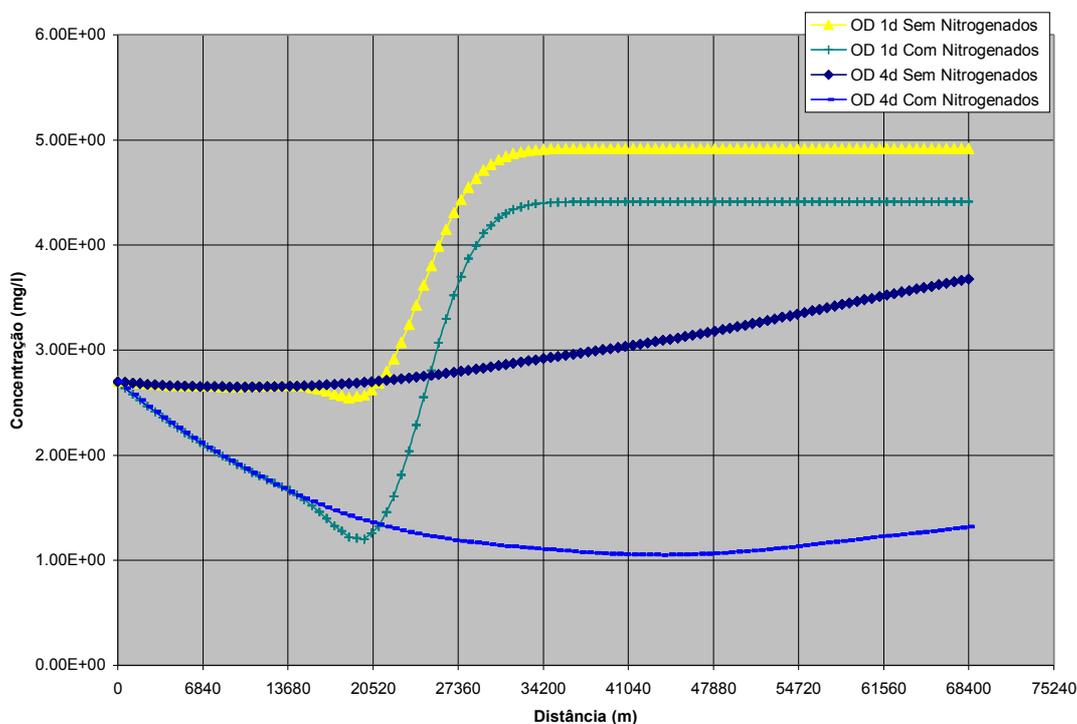


Figura 12: Concentrações de OD, para tempos de simulação de 1 dia e 4 dias, com e sem os compostos nitrogenados

A Figura 12 apresenta os resultados obtidos com as condições iniciais e condições de contorno do corpo d'água apresentadas nas Tabelas 7 e 8, respectivamente, e os resultados dos cenários que consideram todas as concentrações de amônia e nitrato nulas. Com um dia de simulação já se nota uma diferença de 4,41 mg O₂/l de OD para o cenário com compostos de nitrogênio para 4,92 mg O₂/l, sem estes compostos. Para quatro dias a diferença é bem maior, mostrando que a concentração de 1,32 mgO₂/l para o cenário com amônia e nitrato, chega a 3,68 mg O₂/l para o cenário sem estes compostos, proporcionando um grande acréscimo de 179%. De fato, ao longo do tempo a diferença de consumo por conta de compostos nitrogenados tende a se acentuar, porém só seria percebida a partir de 6 dias. Além disso, o aumento observado na disponibilidade de OD não condiz com o valor encontrado na literatura, que relata uma diferença de 23,5%. Pode ser necessário rever as equações, já que os parâmetros utilizados para se fazer os cálculos estão dentro dos valores típicos referenciados.

7.3.3 Influência da Temperatura

A temperatura influencia diretamente a atividade bacteriana na decomposição de matéria orgânica e as taxas de reaeração, bem como altera a concentração de saturação do oxigênio. Como era previsto, para 30°C as taxas de consumo de DBO são mais acentuadas, conseqüentemente fazendo os níveis de OD caírem, contribuindo para a menor quantidade de oxigênio introduzido por reaeração (Figura 13). O trecho desta curva onde se verifica uma depleção quase total de oxigênio é exatamente o mesmo onde se encontra o pico de concentração de DBO, porém, com esta condição seria esperada uma redução da taxa de decaimento da DBO. Os valores de concentração de OD, que estabilizam aproximadamente na metade da extensão do canal e assim seguem até o final, são de 3,6 mg/l e 4,4 mg/l, representando um valor bastante significativo de 20% entre eles.

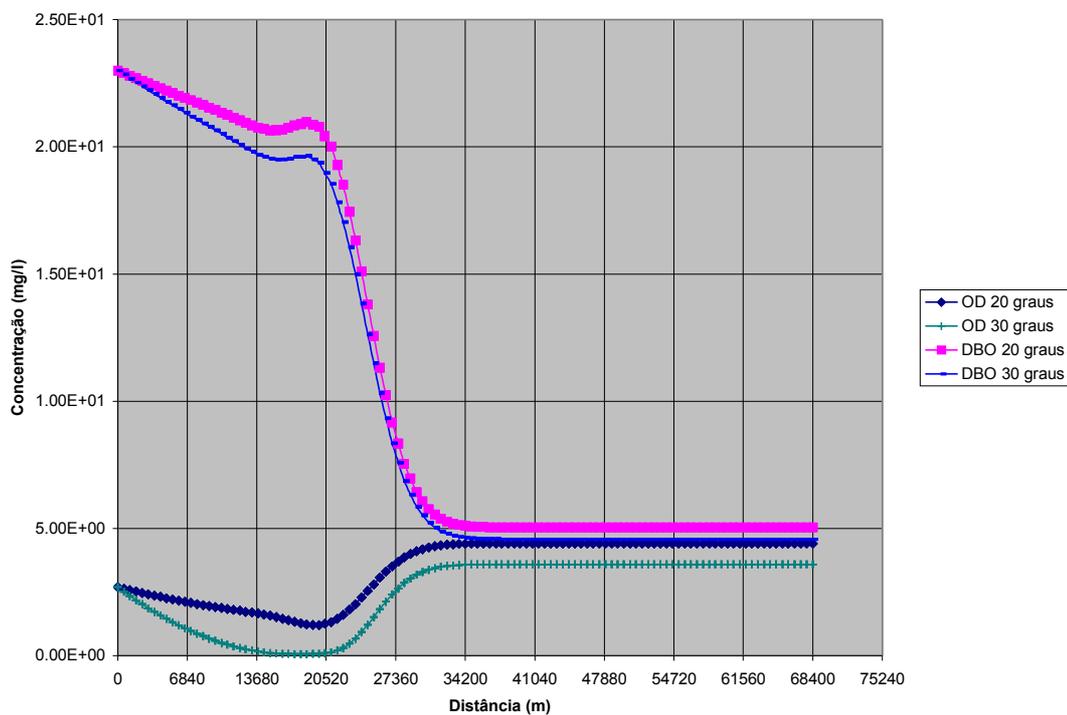


Figura 13: Concentrações de OD e DBO ao longo do canal, para 20°C e 30°C, após 1 dia de simulação

7.3.4 Sedimentação de matéria orgânica

A sedimentação é um processo físico de grande importância na distribuição de DBO no meio, e conseqüentemente interfere no balanço de oxigênio. Vale lembrar que o estudo de HVITVED-JACOBSEN (1982) in LEU (1998), registrou remoção por sedimentação de 35% da matéria orgânica de esgoto combinado - esgoto proveniente de sistema unitário, ou seja, misturado com águas pluviais - para um estudo feito em um trecho de rio com 5 km. IMHOFF (1985) cita que a remoção por sedimentação de DBO de esgotos domésticos em estações de tratamento varia entre 25% e 40%. É certo que neste caso há um fluxo laminar e condições favoráveis são propiciadas, mas para a extensão analisada nestes gráficos poderia ser alcançado o mesmo nível de redução.

Os componentes da DBO sedimentáveis e dissolvidos devem ser determinados analiticamente para cada situação. Isto envolve o uso de cones Imhoff e depende principalmente do nível de tratamento recebido pelo efluente que está sendo lançado no sistema (BHARGAVA, 1983). Portanto, este processo de transferência de DBO do meio líquido para o leito do corpo d'água é de especial importância para esgotos que não passam nem mesmo por um tratamento mais simples, como fossa séptica.

Para melhor visualização, o gráfico mostra apenas o trecho inicial, até 35.000m ao longo do eixo do rio, para o tempo de 6 horas, onde se espera que quase toda a substância orgânica removível por sedimentação discreta (isto é, sem floculação) vá se depositar. As curvas obtidas estabilizam em torno de 10.000m, em um valor que se mantém até o final do canal.

Os parâmetros de maior importância neste processo são a fração de DBO sedimentável e a velocidade de deposição da substância orgânica - VDSO. Como o modelo apenas permite alterar a VDSO, foram simulados cenários com a VDSO nula, que é o padrão do modelo e com as velocidades de sedimentação de matéria orgânica encontradas em JORDÃO, que variam entre 1,89 m/h e 9 m/h, sendo usados estes dois valores, convertidos para a unidade usada no modelo para este parâmetro, ou seja, 45,36 m/dia e 216 m/dia, respectivamente. Os resultados mostram taxas de remoção para este processo maiores do que a realidade (Figura 14), ao se constatar que acontece a eliminação praticamente total da DBO existente. Isto indica que o modelo considera a quantidade total de DBO lançada como sendo sedimentável, o que é um valor interno do programa, que não pode ser alterado pelo usuário.

Foram avaliados os efeitos destas velocidades de deposição de 45,36 m/dia e 216 m/dia nos balanços de amônia e nitrato, entretanto, os gráficos não mostraram nenhuma variação entre si, apresentando valores de concentração iguais. Neste processo seria relevante incluir a possibilidade dos compostos nitrogenados também terem perda por deposição, tanto para os orgânicos particulados, que podem ser transformados em amônia pelo processo de amonificação, quanto para amônia e nitrato solubilizados que podem se adsorver nos sedimentos.

O modelo não quantifica a matéria orgânica depositada no fundo, que pode exercer papel importante em alguns trechos de rios com fluxo mais lento, zonas mortas ou pontos com lançamento de cargas poluidoras. O modelo conta com uma parcela da equação de oxigênio específica para a demanda de sedimentos, porém a sua formulação não guarda nenhuma relação com as taxas de deposição.

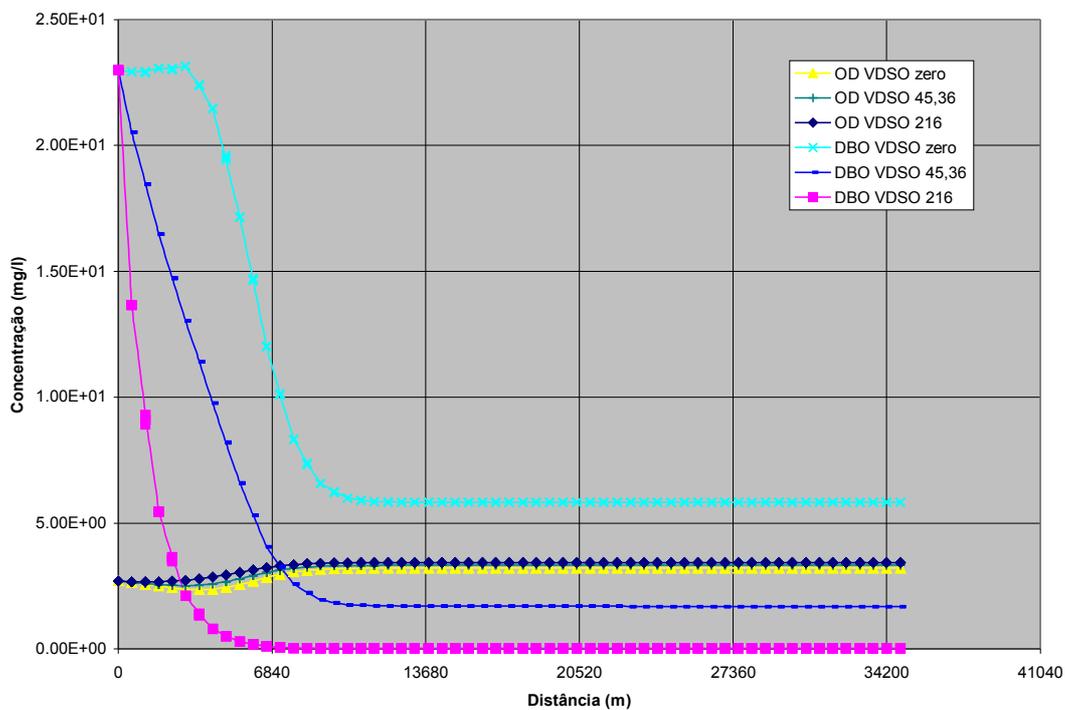


Figura 14: Concentrações de OD e DBO ao longo do canal, para diferentes Velocidades de Deposição de Substância Orgânica, após 6 horas de simulação

7.3.5 Processo de Reaeração

Ao fazer simulações para diferentes profundidades, 4m e 20m, e sem variar o coeficiente de reaeração, foram encontrados resultados idênticos, como era esperado. O modelo considera que o oxigênio que penetra na superfície livre é imediatamente distribuído ao longo da coluna d'água, ou seja, a taxa de transferência é igual qualquer que seja a profundidade do canal. Como já comentado anteriormente, isto é adequado para corpos d'água rasos e que não apresentam estratificação, contudo, para estes dois cenários estudados os resultados se mostram incoerentes. Para diminuir esta limitação, deve-se calcular previamente estes coeficientes para inserir no modelo. Aqui foi usada a fórmula de O'Connor-Dobbins (TSVOGLOU&NEAL, 1976), que se aplica a rios fundos e lentos, sendo encontrados os valores de $K_a=0,255 \text{ d}^{-1}$, para 4m, e $K_a=0,023 \text{ d}^{-1}$, para 20m. A Figura 15 mostra os resultados encontrados para estes valores de profundidade e de coeficiente de reaeração.

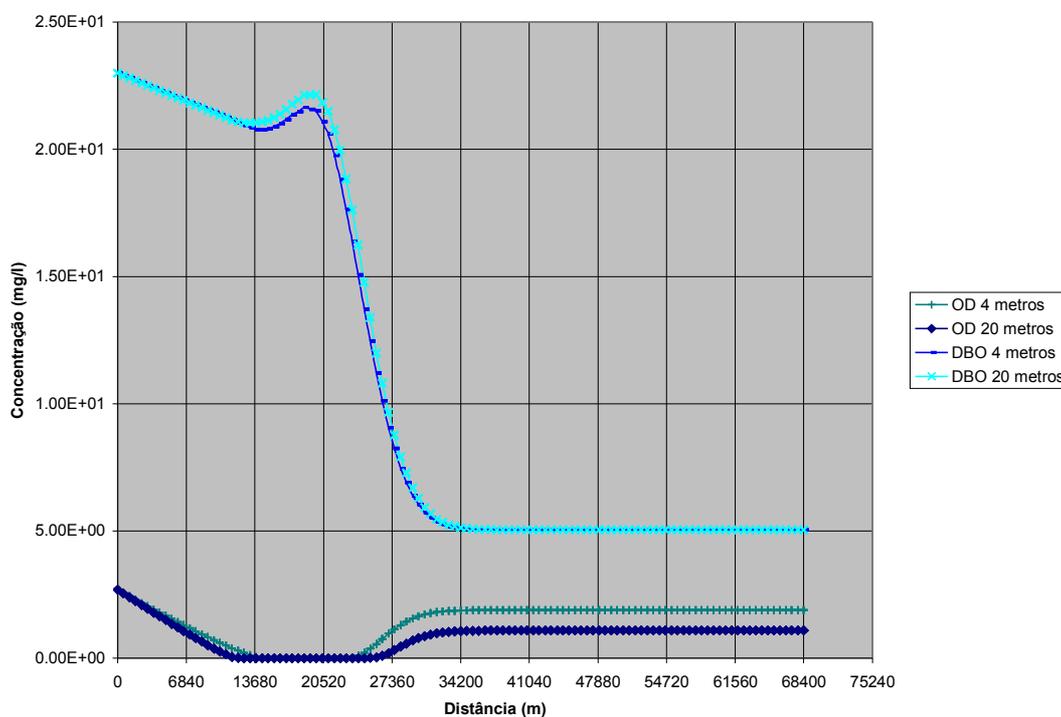


Figura 15: Concentrações de OD e DBO para profundidades de 4m e 20m e seus coeficientes de reaeração, de $0,255 \text{ d}^{-1}$ e $0,023 \text{ d}^{-1}$, respectivamente

Analisando as curvas de OD, é possível perceber que as diferenças entre as concentrações ao longo do rio são ínfimas. Conseqüentemente, o decaimento de DBO também apresenta curvas bastante semelhantes, tendo variação apenas no pico de concentração de DBO, que coincide com o trecho onde o OD tende a zero. Para este estudo o cálculo é bastante simples, já que a profundidade e a velocidade de escoamento são constantes, no entanto, para casos reais isto não ocorre. O ideal seria que o modelo calculasse o coeficiente de reaeração, ao menos para as condições iniciais, não necessariamente considerando as variações em função de velocidade e profundidade, pois não traria ganhos práticos e ainda sobrecarregaria o processamento numérico.

8 Conclusões e Recomendações

As possibilidades de aplicação de modelos de qualidade d'água - e modelos ambientais em geral - para a gestão e planejamento ambiental, licenciamento ambiental e planos de recursos hídricos são muito extensas. No entanto, dentre estes instrumentos de política de meio ambiente e de recursos hídricos o que utiliza mais freqüentemente os modelos ambientais é o licenciamento para empreendimentos de grande porte. Ainda assim, os prognósticos resultantes destas simulações têm influência apenas ao definir melhores alternativas locais para descarte de efluentes e indicar melhorias no desenvolvimento dos projetos. O uso dos modelos ambientais para gestão e planejamento por órgãos ambientais todavia está muito distante de se tornar viável, face às políticas ambientais em todas as esferas do governo, que priorizam a remediação em detrimento da prevenção.

Esta dissertação indica os principais processos a serem melhor estudados para o desenvolvimento do modelo de qualidade d'água do SisBAHIA®. Para se aprofundar no detalhamento de cada processo é essencial realizar simulações para casos reais, com coleta de dados em campo, e comparar com resultados simulados. Com isso, e fazendo alterações na formulação matemática do modelo, pode-se chegar a ajustes mais precisos das equações.

Um dos principais avanços que vem sendo implementado no modelo de qualidade d'água aqui estudado é a inclusão da dinâmica biológica nas equações. Em diversos outros modelos é possível avaliar o impacto da abundância de nutrientes no crescimento de algas, que, além de oferecer risco de contaminação por toxinas, influencia sobremaneira diversos outros parâmetros de qualidade d'água. No entanto, para este modelo seria necessária outra configuração espacial para aplicar esta função, já que os processos biológicos dependem fortemente da distribuição dos organismos ao longo da coluna d'água. Com isto, também seria possível diferenciar a atividade bentônica, que tem grande representatividade na decomposição de compostos carbonáceos, nitrogenados e fosforados. Como os processos biológicos não foram objeto de estudo nesta dissertação, recomendam-se trabalhos específicos para abordar este assunto

O processo de nitrificação possui uma fase de retardo que não é considerada no modelo. A implantação deste atraso é de difícil formulação, tendo em vista que seria necessário diferenciar a idade da carga de esgoto lançada e a atividade das bactérias nitrificantes ao

longo do canal. Também se recomenda a implementação nas equações da concentração crítica de OD, de 0,2 mg/l, abaixo da qual não acontece a nitrificação. A quantidade de OD consumido por compostos nitrogenados atinge 179% do consumo de matéria orgânica carbonácea, um valor muito superior ao encontrado na literatura, que é de 23,5%.

Analisando a deposição de substâncias, se observou que este processo não contempla os compostos nitrogenados, que comumente apresentam significativa remoção por esta via, seja na forma de compostos nitrogenados, seja adsorvidos no sedimentos na forma de amônia e nitrato. Seria necessária a inclusão deste termo nas equações destas substâncias. O modelo, embora possua um termo que define a fração de DBO dissolvida, donde se calcula a fração de DBO sedimentável, não permite a mudança deste valor, o que seria recomendado para representar melhor as particularidades da carga poluidora para cada caso simulado. A matéria orgânica depositada é considerada como se fosse removida do sistema, quando, de fato, ela foi transferida para outro setor dentro do sistema, o leito do corpo d'água. Nas equações do modelo existe um termo que representa a demanda de sedimentos, contudo, não existe uma relação deste termo com o processo de deposição, o que poderia vir a ser implantado.

É necessária a obtenção de séries de dados ao longo do ano, considerando as variações sazonais dos dados de entrada. Ao confrontar os resultados do SisBAHIA® com os dados de campo, pode-se fazer a calibragem para diversas condições e ambientes.

9 Bibliografia

ALDAMA, A.: 1985, *Theory and applications of two- and three-scale filtering approaches for turbulent flow simulation*. Ph.D. Thesis, Dept. Civil Engineering, Massachusetts Institute of Technology.

AMARAL, K.J. (2003) *Estuário Do Rio Macaé: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos*. Tese de Mestrado apresentada à COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.

ARCEIVALA, S.J. (1981) *Wastewater Treatment and disposal*. Marcel Dekker, New York.

BARNES, D. & BLISS, P.J. (1983) *Biological control of nitrogen in wastewater treatment*. E. & F.N. Spon, London. 146 p.

BHARGAVA, D.S. (1983) *Most rapid BOD assimilation in Ganga and Yamuna rivers*. Journal of Environmental Engineering, ASCE 109, 174-187.

BRAGA, Benedito *et al.* (2002) *Introdução à Engenharia Ambiental*. Prentice Hall, São Paulo.

BROWN, Theodore L. (1997) *Chemistry: the central science*. Prentice Hall, New Jersey.

BROWN, L.C. & BARNWELL JUNIOR, T.O (1987) *The enhanced stream quality models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: USEPA, Athens. Versao 3.0 Sistema Operacional e Manual do Usuário*.

BUCHANAN, Jones (2000) *Biochemistry and Molecular Biology of Plants*. American Society for Plant Physiology

CETESB, Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (1985) *Qualidade das Águas Interiores do Estado de São Paulo*, CETESB, São Paulo.

CONAMA – Conselho Nacional de Meio Ambiente (1986) Resolução nº 20 - Estabelece a classificação das águas, doces, salobras e salinas do Território Nacional.

COX, B.A. (2003) *A review of currently available in-stream water quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in lowland rivers*. The Science of Total Environment Journal 314-316: 335-377.

CUNHA, C.L.N. (2001) *Notas pessoais*. Não publicado. Rio de Janeiro.

CUNHA, C.L.N.; MONTEIRO, T.C.; ROSMAN, P.C.C. (2002) *Modelagem bidimensional de transporte de escalares não-conservativos em corpos d'água rasos*. Revista Brasileira de Recursos Hídricos, v.7, n. 2.

CUNHA, C.L.N.; MONTEIRO, T.C.; ROSMAN, P.C.C. (2003) *Poluição em rios utilizando modelagem computacional*. Revista Engenharia Sanitária e Ambiental Vol. 8 – Nº3: 126-134.

DEMUYNCK, C. *et al* (1997) *Evaluation of Pollution Reduction Scenarios in a River Basin: Application of Long Term Water Quality Simulations*. Water Science Technology Vol. 35 No. 9: 65-75.

DROOP M.R. (1983) *25 years of algal growth kinetics*. A personal view. Bot. Mar. 26, 99-112

ECKENFELDER Jr., W.W. (1980) *Principles of water quality management*. Boston, CBI.

EIGER, Sergio (1991) *Qualidade da Água em Rios e Estuários*, Capítulo do livro Hidrologia Ambiental de Porto, R.L.L. et al. ABRH/EDUSP, São Paulo

FAIR G.N.; GEYER, J.C.; OKUN, D.A. (1979) *Ingeneria sanitaria y de aguas residuales. Purificacion de aguas y tratamiento y remocion de aguas residuales*. Ed. Limusa, Mexico, Vol. II, 764p.

FISCHER, H.B.; LIST, E.J.; KOH, R.C.Y.; Imberger, J. & Brooks, N.H. (1979) *Mixing in Inland and Coastal Waters*. Academic Press, Inc. New York.

HENRY, J. Glyn; HEINKE, Gary W. (1995) *Environmental Science and Engineering*. Prentice Hall, New Jersey.

HVITVED-JACOBSEN, T. (1982) *The Impact of Combined Sewer Overflow on the Dissolved Oxygen Concentration of a River*. Water Research 16: 1099-1105.

IMHOFF, Karl e Klaus R. (1985) *Manual de Tratamento de Águas Residuárias*. Ed. Edgar Blucher, São Paulo.

JORDÃO, E.P., Pessoa C.A. (1995) *Tratamento de Esgotos Domésticos*. ABES, Rio de Janeiro.

Lei Federal nº 6.938 (1981) Dispõe sobre a Política Nacional do Meio Ambiente, seus fins e mecanismos de formulação e aplicação, e dá outras providências

Lei Federal nº 9.433 (1997) Dispõe sobre a Política Nacional dos Recursos Hídricos

LEU, H. G.; LEE, C. D.; OUYANG, C. F.; Pai, T. Y. (1998) *A Modified Water Quality Model for Predicting BOD and DO Variations in a Shallow Polluted Channel*. Environmental Technology 19: 933-940.

MENDONÇA, S.R. (2000) *Sistema de Lagunas de Estabilización*. Mc Graw-Hill Interamericana. Santa Fé de Bogotá.

METCALF&EDDY (1981) *Tratamiento y Depuración de las Aguas Residuales*. Editorial Labor S.A., Barcelona.

RAST, W. & LEE, G.F. (1978) *Summary Analisis of the North America (US portion) OECD Eutrophication Project: Nutrient Loading Lake Response Relationship and Trophic Indices*. USEPA Corvallis Environmental Research Laboratory EPA 600/3-78-008 454p.

RIGLER, F.H. (1964) *The Phosphorus Fractions and the Turnover Time of Inorganic Phosphorus in Different Types of Lakes*. Limnology and Oceanography 9: 511-518.

ROSMAN, P.C.C. (1987) *Modeling Shallow Water Bodies via Filtering Techniques*, Ph.D. Thesis, Dept. of Civil Engineering, Massachusetts Institute of Technology.

ROSMAN, P. C. C. (1997) “Subsídios para Modelagem de Sistemas Estuarinos”. In: ROSMAN, P. C. C., MASCARENHAS, F. C. B., MIGUEZ, M. G., CAMPOS, R. O. G., EIGER, S., *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos 3*, 1 ed., capítulo 3, Rio de Janeiro, RJ, Associação Brasileira de Recursos Hídricos.

ROSMAN, P. C. C. (2000), *Referência Técnica do SISBAHIA – SISTEMA BASE DE HIDRODINÂMICA AMBIENTAL*, Programa COPPE: Engenharia Oceânica, Área de Engenharia Costeira e Oceanográfica, UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil.

ROSMAN, P. C. C. (2001) “Um Sistema Computacional de Hidrodinâmica Ambiental”. In: ROSMAN, P. C. C., MASCARENHAS, F. C. B., MIGUEZ, M. G. et al., *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos 5*, 1 ed., capítulo 1, Rio de Janeiro, RJ, Associação Brasileira de Recursos Hídricos.

SALATI, Eneida (1996) *Diagnóstico ambiental sintético e qualidade da água no Rio Corumbataí como um subsídio para o planejamento regional integrado da Bacia Hidrográfica do Rio Corumbataí*. Tese de Doutorado apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos - USP.

SAWYER, C.N., Mc Carty, P.L. (1978) *Chemistry for environmental engineering*. 3rd ed. Mc Graw-Hill, New York 532p.

SEITZINGER, S. P. (1988). *Denitrification in freshwater and coastal marine ecosystems: ecological and geochemical significance*. *Limnology and Oceanography* 33: 702–724.

SELLERS, W.D. (1965) *Physical Climatology*. The University of Chicago Press/Chicago&London

STERNER, J.W., GROVER R.P. (1998) *Algal growth in warm temperate reservoirs: kinetic examination of nitrogen, temperature, light, and other nutrients*. Wat. Res. Vol. No. 12 3539-3548

STREETER, W.H., PHELPS, E.B. (1925) *A study of the pollution and natural purification of the Ohio River*, Public Health Bull. 146, U.S. Public Health Service, Washington D.C.

THOMANN, R.V.; MUELLER, J.A. (1987) *Principles of Surface Water Quality Modeling and Control*. Harper & Row, Publishers, New York.

TSIVOGLU, E.C.; NEAL, L.A. (1976) *Tracer measurement of reaeration: predicting the reaeration capacity of inland streams*. Journal of Water Pollution Control Federation 48: 2669-89

USEPA (1975) United States Environmental Protection Agency. *Process design manual for Nitrogen control*. Washington, DC.

USEPA (1985) United States Environmental Protection Agency. *Rates, constants and kinetics formulations in surface water quality modeling* 2.ed. Athens.

VON SPERLING, M. (1987) *A study on reaeration in river cascades*. Water Science and Technology, 19: 757-767

VON SPERLING, M. (1996a) *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos* 2.ed. DESA/UFMG. Belo Horizonte.

VON SPERLING, M. (1996b) *Princípios básicos do tratamento de esgotos*. DESA/UFMG. Belo Horizonte.

VON SPERLING, M. (1997) *Lodos Ativados*. DESA/UFMG. Belo Horizonte.

WEF (1991) *Design of Municipal Wastewater Treatment Plants*. WEF, Alexandria, USA.

WUHRMANN, K. (1972) *Stream Purification in Water Pollution Microbiology*, R. Mitchell (ed.), Wiley-Interscience, 2, 119-152, New York.

YEATS, P. A. (1990). *Reactivity and transport of nutrients and metals in the St. Lawrence Estuary*. In M. I. El-Sabh, & N. Silverberg (Eds.), *Oceanography of a large-scale estuarine system, the St.-Lawrence*. Coastal and estuarine studies Vol. 39 (pp. 155–165). New York: Springer-Verlag.