# FERRAMENTA COMPUTACIONAL QUALI-TOOL

### MANUAL DO USUÁRIO







## **QUALI-TOOL**

Uma ferramenta gráfica-interativa para simulação da qualidade da água em ambientes lóticos.

Versão Educacional 1.00

Uberlândia, Julho de 2017

http://www.feciv.ufu.br/ppgec/quali\_tool

#### ARIEL ALI BENTO MAGALHÃES1

MARCIO RICARDO SALLA<sup>2</sup>

JOSÉ EDUARDO ALAMY FILHO<sup>3</sup>

# FACULDADE DE ENGENHARIA CIVIL PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Mestre em Engenharia Civil pela Universidade Federal de Uberlândia (2017)

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Doutor em Engenharia Hidráulica e Saneamento pela Universidade de São Paulo (2006); Pósdoutorado pelo Instituto de Ingeniería del Agua y Medio Ambiente de la Universidad Politecnica de Valencia – IIAMA/UPV (2013)

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Doutor em Engenharia Hidráulica e Saneamento pela Universidade de São Paulo (2006)

Os usuários desta versão educacional do programa estão livres de qualquer compromisso para usá-lo. Entretanto, nem os autores, nem a UFU, nem qualquer outra Instituição relacionada são responsáveis pelo uso ou mau uso do programa e de seus resultados. Os acima mencionados não têm nenhum dever legal ou responsabilidade para com qualquer pessoa ou companhia pelos danos causados direta ou indiretamente resultantes do uso de alguma informação ou do uso do programa aqui disponibilizado. O usuário é responsável por toda ou qualquer conclusão feita com o uso do programa. Não existe nenhum compromisso de bom funcionamento ou qualquer garantia.

### Sumário

1 INTRODUÇÃO	6
2 INTERFACE QUALI-TOOL	6
2.1 TOPOLOGIA DO SISTEMA HÍDRICO	7
2.1.1 Fundamentação teórica	9
2.2 SEÇÕES TRANSVERSAIS	9
2.3 DISCRETIZAÇÃO	11
2.3.1 Fundamentação teórica	12
2.4 VAZÕES PONTUAIS	13
2.5 VAZÕES DIFUSAS	14
2.6 HIDRÁULICA DE CANAIS	15
2.7 CONCENTRAÇÕES PONTUAIS	16
2.8 CONCENTRAÇÕES DIFUSAS	17
2.9 COEFICIENTES	18
2.10 CONCENTRAÇÕES (RESULTADOS)	20
2.11 ANEXOS	21
3 FÓRMULAS UTILIZADAS	24
3.1 HIDRÁULICA DE RIOS	24
3.1.1 Cálculo da vazão	24
3.1.2 Nível líquido	24
3.1.3 Velocidade média do escoamento	24
3.1.4 Tensão cisalhante (τ)	25
3.1.5 Número de Froude Fr	25
3.2 EQUAÇÃO DE MISTURA	25
3.3 EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO	26
3.4 CASOS PARTICULARES	28
3.4.1 Caso o usuário não deseja simular algum parâmetro	28
3.4.2 Caso o usuário não possua dados de topologia (coordenadas e elevações)	29
4 CONSIDER A CÕES GER A IS	29

5 PROCESSOS MODELADOS E CONSTITUINTES	31
5.1 PROCESSOS MODELADOS	31
5.2 CONSTITUINTES	31
5.2.1 Matéria orgânica carbonácea	32
5.2.2 Nitrogênio orgânico e suas frações	32
5.2.3 Oxigênio Dissolvido	32
5.2.4 Fósforo Total	32
5.2.5 Escheria Coli	32
5.2.6 Metais pesados	33
5.2.7 Contaminantes Arbitrários (sólidos suspensos e compostos tóxicos)	33
6 UNIDADES DE ENTRADA	33
TABELA 10 – UNIDADES DE ENTRADA NA FERRAMENTA QUALI-TOOL EM	
HIDRÁULICA E CONCENTRAÇÕES	34
REFERÊNCIAS	35

#### 1 INTRODUÇÃO

A ferramenta computacional QUALI-TOOL permite a simulação da qualidade de água em ambiente lótico em escala local (apenas trechos de rio) e em escala de bacia hidrográfica com limitação de 15 tributários (afluentes) no rio principal. Foi desenvolvida pelo grupo de pesquisa da área de recursos hídricos e saneamento ambiental do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil - PPGEC da Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

O objetivo principal no desenvolvimento desta ferramenta computacional é auxiliar alunos de graduação e pós-graduação das diversas áreas de conhecimento no entendimento dos processos físicos, químicos e biológicos dos diversos parâmetros de qualidade de água em ambiente natural lótico, considerando entradas pontuais e difusas de cargas poluidoras e retiradas pontuais consuntivas e não consuntivas. Esta primeira versão de QUALI-TOOL não considera a interação das águas superficiais com as subterrâneas.

O usuário define quais parâmetros de qualidade da água pretende modelar a partir da necessidade particular da área de estudo. Dependendo do nível de precisão requerido para os processos envolvidos, esta ferramenta computacional de uso livre tem potencial para aplicação em trabalhos técnicos de consultoria na área ambiental. O usuário poderá baixar o executável do QUALIT-TOOL, o manual do usuário e o exemplo prático no link <a href="https://www.feciv.ufu.br/ppgec/quali\_tool.">www.feciv.ufu.br/ppgec/quali\_tool.</a>

#### 2 INTERFACE QUALI-TOOL

Esta 1ª versão da ferramenta computacional QUALI-TOOL foi desenvolvida para simulações da qualidade de água em ambiente lótico dos seguintes parâmetros de qualidade da água: contaminantes arbitrários (sólidos suspensos, por exemplo - o usuário pode escolher um outro parâmetro como arbitrário), Oxigênio Dissolvido (OD), Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO), ciclo do Nitrogênio (nitrogênio orgânico, amônia, nitrito e nitrato), Fósforo total, coliforme fecal *Escherichia Coli* (*E-coli*) e metais pesados.

Na tela principal da ferramenta é relacionada a ordem de lançamento dos dados para a melhor utilização da ferramenta QUALI-TOOL, conforme ilustra a Figura 1. As planilhas denominadas topologia, discretização, hidráulica e concentrações (resultados) são planilhas de cálculo. Já as planilhas denominadas seções transversais, vazões pontuais, vazões difusas, concentrações pontuais, concentrações difusas e coeficientes são planilhas de cadastro, nas quais o usuário

deve fornecer os dados de entrada e informar o que deseja modelar. Como exemplo, caso não interesse ao usuário simular o parâmetro *E-coli*, basta que valores não sejam inseridos nas células de entrada ("vazio").

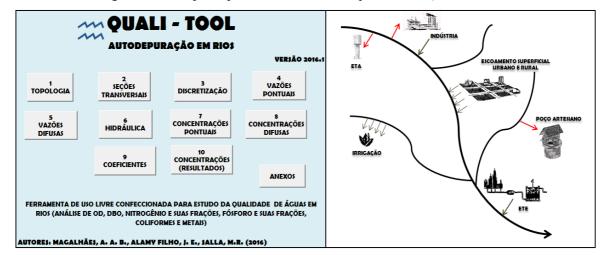


Figura 1 – Tela principal da ferramenta computacional QUALI-TOOL

Fonte: Autora (2017)

Em todas as planilhas mencionadas anteriormente, os dados de entrada são formatados na cor preta, enquanto os dados calculados pela ferramenta QUALI-TOOL são formatados na cor azul.

#### 2.1 TOPOLOGIA DO SISTEMA HÍDRICO

Na seção "topologia", o usuário deve inserir todas as informações do rio principal e de seus tributários que serão analisados. As informações iniciais são: coordenadas X (leste – oeste) em metros; Y (norte – sul) em metros e também Z em metros, que representa a cota do terreno. Como exemplo, essas coordenadas em UTM (*Universal Transversa de Mercator*) podem ser obtidas no Google Earth® ou por meio de uma ferramenta SIG, como QGis®, conforme ilustra a Figura 2.

Ao final do preenchimento de todos os dados do rio principal e tributários, o usuário deve pressionar o botão "EXECUTAR", assim o programa calculará o comprimento do rio, em metros, a declividade, em metros por metros, conforme ilustra a Figura 3. Entre o lançamento do rio principal e os seus afluentes, o usuário poderá observar no gráfico das coordenadas lançadas e verificar se está coerente com o real. Esta versão da ferramenta computacional QUALI-TOOL limita o máximo de 15 tributários para o rio principal.

Vet<u>o</u>r <u>R</u>aster Base de dados Web Ajuda Captura de Coordenadas Analisar Captura de Coordenadas -68.28297,-4.99909 -68.28297,-4.99909 8 Copiar para a área de transferência \* Iniciar captura (a) Google Earth - Editar Marcador Latitude: 18°59'17.56"S Longitude: 48°11'21.85"O Descrição Estilo/Cor Visualizar Altitude

Figura 2 – Captura das coordenadas em: (a) QGis®; (b) Google Earth®

Fonte: QGis (2017) e Google Earth (2017)

(b)

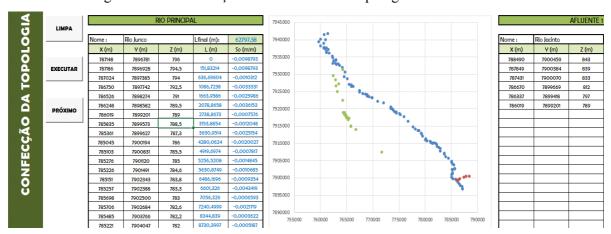


Figura 3 – Tela de lançamento dos dados da topologia do sistema hídrico

Fonte: Autora (2017)

#### 2.1.1 Fundamentação teórica

Para o traçado de qualquer trecho de rio deve-se incluir as coordenadas UTM X (leste-oeste) em metros, UTM Y (norte-sul) em metros e UTM Z (cota) em metros.

Verifica-se na Figura 04(a) que a distância L entre os pontos A e B é a hipotenusa do triângulo retângulo, que pode ser calculada aplicando o Teorema de Pitágoras. Com o auxílio da Álgebra e de conhecimentos geométricos pode-se generalizar e construir uma fórmula que determine a distância entre dois pontos no plano, conhecendo suas coordenadas, conforme exemplifica a Equação 01.

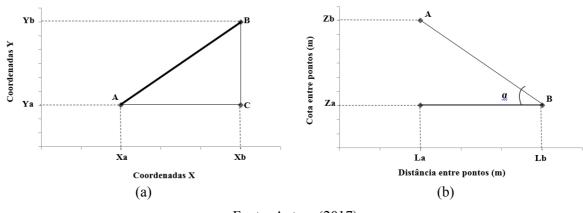
Cateto BC: Yb – Ya

Cateto AC: Xb - Xa

Hipotenusa AB = distância (L)

$$L = \sqrt{(Yb - Ya)^2 + (Xb - Xa)^2}$$
 (1)

Figura 4 – Cálculo entre coordenadas: (a) da distância; (b) da declividade



Fonte: Autora (2017)

Para o cálculo da declividade entre os pontos A e B, conforme ilustra a Figura 04(b), calculase a tangente do ângulo α, conforme mostra a Equação 02.

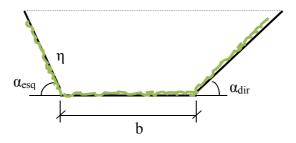
$$S_o = \tan(\alpha) = \frac{Z_b - Z_a}{L_b - L_a}$$
 (2)

#### 2.2 SEÇÕES TRANSVERSAIS

Na aba "Seções transversais" o usuário deverá, ao longo de todo comprimento do curso de água (rio principal, afluente 1, afluente 2...), inserir os dados hidráulicos e geométricos da seção transversal, tais como: comprimento L (o mesmo calculado na equação 1) do trecho com as

mesmas características hidráulicas e geométricas desde o ponto inicial de simulação; valor da largura de base b para o trecho; rugosidade da calha principal do rio  $\eta$  para o trecho; ângulos (em graus) dos taludes esquerdo ( $\alpha_{esq}$ ) e direito ( $\alpha_{dir}$ ) para o trecho. Todas essas medidas são dadas em metros, exceto a rugosidade da calha, que é adimensional. A Figura 5 traz o esquema de uma seção transversal genérica utilizada pela ferramenta computacional QUALI-TOOL. Já a Figura 6 ilustra o lançamento de dados na aba "Seção transversal".

Figura 5 – Seção transversal genérica utilizada pela ferramenta computacional QUALI-TOOL



Fonte: Autora (2017)

Figura 6 – Lançamento dos dados na aba "Seção transversal"

LIMPA	RIO PRINCIPAL					AFLUENTE 1				AFLUENTE 2				
	Ls(m)	b (m)	aesq (°)	n calha	α <sub>dir</sub> (°)	Ls(m)	b (m)	α <sub>esq</sub> (°)	n calha	α <sub>dir</sub> (°)	Ls(m)	b (m)	α <sub>esq</sub> (°)	n calha
	0,00	14,00	48,00	0,04	45,00	0,00	6,00	47,00	0,03	75,00	0,00	5,00	45,00	0,04
	2739,00	16,00	46,00	0,04	47,00	1168,00	6,50	50,00	0,03	70,00	19445,00	5,30	46,00	0,04
	15593,00	16,50	46,00	0,04	49,00	2830,00	7,20	45,00	0,03	65,00	24007,00	6,50	48,00	0,04
	17242,00	17,50	48,00	0,04	45,00						38355,00	7,00	50,00	0,04
PRÓXIMO	21759,00	18,00	45,00	0,04	47,00									
	35220,00	18,50	46,00	0,05	48,00									
	46572,00	21,00	48,00	0,05	45,00									
	62798,00	24,00	45,00	0,04	47,00									
						L								

Fonte: Autora (2017)

A Tabela 1 traz os valores de referência para os coeficientes de rugosidade de Manning em canais naturais e artificiais (PORTO, 1998). A literatura traz diversas outras referências sobre o tema.

Após o lançamento dos dados na janela "Seção transversal", o usuário irá para a próxima etapa, pressionando o botão "PRÓXIMO" (ver a Figura 6), que abrirá uma janela referente à aba "Discretização".

Tabela 1 Coeficientes de rugosidade de Manning

Natureza das paredes		Condiç	ões	_
ivatureza das paredes	Muito boa	Boa	Regular	Má
Alvenaria de pedra argamassada	0.017	0.020	0.025	0.030
Alvenaria de pedra aparelhada	0.013	0.014	0.015	0.017
Alvenaria de pedra seca	0.025	0.033	0.033	0.035
Alvenaria de tijolos	0.012	0.013	0.015	0.017
Calhas metálicas lisas (semicirculares)	0.011	0.012	0.013	0.015
Canais abertos em rocha (irregular)	0.035	0.040	0.045	-
Canais com fundo em terra e talude com pedras	0.028	0.030	0.033	0.035
Canais com leito pedregulhoso e talude vegetado	0.025	0.030	0.035	0.040
Canais com revestimento de concreto	0.012	0.014	0.016	0.018
Canais de terra (retilínios e uniformes)	0.017	0.020	0.023	0.025
Canais dragados	0.025	0.028	0.030	0.033
Condutos de barro (drenagem)	0.011	0.012	0.014	0.017
Condutos de barro vitrificado (esgoto)	0.011	0.013	0.015	0.017
Condutos de prancha de madeira aplainada	0.010	0.012	0.013	0.017
Gabião	0.022	0.030	0.035	-
Superficies de argamasse de cimento	0.011	0.012	0.013	0.050
Superfícies de cimento alisado	0.010	0.011	0.012	0.030
Córregos e rios limpos, retilínios e uniformes	0.025	0.028	0.030	0.033
Córregos e rios limpos, retilínios e uniformes com pedras e vegetação	0.030	0.033	0.035	0.040
Córregos com meandros, bancos e poços, limpos	0.035	0.040	0.045	0.050
Margens espraiadas, pouca vegetação	0.050	0.060	0.070	0.080
Margens espraiadas, muita vegetação	0.075	0.100	0.125	0.150

Fonte: Adaptado de Porto (1998)

#### 2.3 DISCRETIZAÇÃO

Na área de modelagem matemática, discretizar significa dividir ou particionar um todo (distância, tempo...) em partes menores, o que otimiza a solução numérica pelo Método de Elementos Finitos (MEF) na ferramenta QUALI-TOOL. Nesta seção da ferramenta computacional, o usuário deve escolher a quantidade de nós que fará parte da malha discretizada, sabendo que quanto maior o número de nós escolhidos, menor o valor do intervalo de comprimento e melhor serão os resultados obtidos. Porém, quanto maior o número de nós mais lento será o processamento computacional para o cálculo matemático.

Após aberta a aba "Discretização", o usuário deve apenas digitar na célula correspondente o número de nós desejado e clicar no ícone "RODA" para que os cursos de água sejam discretizados (ver Figura 7). Ainda na Figura 7, cada trecho discretizado traz informações das

coordenadas UTM (m), comprimento linear L (m), declividade de fundo So (m/m), largura de base b (m), ângulos dos taludes esquerdo  $\alpha_e$  e direito  $\alpha_d$  (°) e coeficiente de rugosidade de Manning  $\eta$  (adimensional).

Figura 7 – Janela da aba "Discretização"

Fonte: Autora (2017)

Após o lançamento dos dados na janela "Discretização", o usuário irá ir para a próxima etapa, pressionando o botão "PRÓXIMO" (ver Figura 7), que abrirá a janela referente às "Vazões pontuais".

#### 2.3.1 Fundamentação teórica

A ferramenta computacional QUALI-TOOL utiliza o Método de Elementos Finitos (MEF) para a solução de equações matemáticas que descrevem fenômenos físicos em engenharia, como neste caso, o escoamento líquido em canal natural. De maneira simples, o MEF consiste na divisão do domínio em um número finito de pequenas regiões denominadas de 'elementos finitos'.

Um problema central ao MEF é a fragmentação de cada variável que caracteriza o escoamento líquido em inúmeros trechos discretizados. O argumento básico é que, para a análise mais correta possível, devem ser escolhidas as menores dimensões destas variáveis. Conforme já mencionado anteriormente, esta ferramenta discretiza as seguintes variáveis: coordenadas X, Y e Z(m); comprimento do rio L(m); declividade do rio So(m/m); largura de base b(m); ângulos dos taludes da margem esquerda e direita (graus),  $\alpha_e$  e  $\alpha_d$ , respectivamente; coeficiente de rugosidade de Manning  $\eta$  (adimensional).

Na primeira etapa da discretização, estipula-se o número finito de células em que o intervalo será subdividido. O termo discretização é usado justamente porque passa-se de um meio contínuo (neste caso o curso de água, com uma reunião infinita de pontos) para um conjunto discreto (com uma reunião definida de intervalos). Em cada um destes intervalos aproxima-se a função original por um segmento de reta (GIACCHINI, 2012).

Evidentemente, quanto menor o comprimento do intervalo, mais a função se aproxima da original. Após estipular o número de células (pontos ou nós), determina-se o tamanho do intervalo dL, calculado conforme a Equação 3.

$$dL = \frac{L_{\text{total}}}{N_{\text{c-1}}} \tag{3}$$

Na qual: dL é o comprimento de cada trecho do rio discretizado, em metros; L<sub>total</sub> é o comprimento total do rio, em metros; Nc é o número de nós ou pontos estipulados pelo usuário. Para o melhor entendimento da equação (3), um curso de água com 1000 m de comprimento e com 5 trechos discretizados de 200 m, possui 6 nós ou pontos.

#### 2.4 VAZÕES PONTUAIS

Na aba "Vazões pontuais" o usuário deve descrever e relacionar todos os lançamentos pontuais e retiradas pontuais no curso de água principal e em seus tributários, incluindo o comprimento (em metros) e o valor da vazão (em m³/s) a partir do início do rio em que ocorrem essas injeções ou retiradas. O valor negativo para a vazão significa retirada pontual de água (irrigação, dessedentação, abastecimento público, etc.), enquanto que o valor positivo para a vazão significa lançamento pontual no curso de água (afluente ou tributário, despejo de efluente sanitário, etc.). A Figura 8 ilustra a aba "vazões pontuais".

Ainda na Figura 8, na célula correspondente a Qaf (m³/s), o usuário deverá fornecer o valor da vazão no ponto inicial da simulação, tanto no rio principal quanto em seus. O usuário *não* deve relacionar as vazões dos afluentes no rio principal. A ferramenta o faz automaticamente. Após o lançamento de entradas e retiradas de vazão em todos os tramos, o usuário irá para a próxima etapa, pressionando o botão "PRÓXIMO" (ver Figura 8), que abrirá uma janela para incluir os dados de vazões difusas.

Figura 8 - Janela da aba "Vazões pontuais"

Fonte: Autora (2017)

#### 2.5 VAZÕES DIFUSAS

Da mesma forma descrita no item "vazões pontuais", o usuário deve descrever e relacionar todos os lançamentos e retiradas difusas em todos os trechos da topologia, informando o comprimento (em metros) e o valor da vazão (em m³/s.m) a partir do início do rio em que iniciam e finalizam essas injeções ou retiradas.

O valor negativo para a vazão significa retirada difusa de água do curso de água (interface com lençol freático, por exemplo), enquanto que o valor positivo para a vazão significa lançamento difuso no curso de água (carreamento superficial de nutrientes em função de evento chuvoso, por exemplo). A Figura 9 ilustra a aba "vazões difusas".

| Companies | Comp

Figura 9 – Janela da aba "Vazões difusas"

Fonte: Autora (2017)

Após o lançamento de entradas e retiradas difusas de vazão no rio principal e nos afluentes, o usuário irá para a próxima etapa, pressionando o botão "PRÓXIMO" (ver Figura 10), que abrirá uma janela referente à aba "Hidráulica".

#### 2.6 HIDRÁULICA DE CANAIS

Após aberta a aba "Hidráulica", o usuário pressiona o botão "1ª PARTE VAZÕES" (ver Figura 10) para geração dos dados hidráulico: vazão (m³/s), ângulos do talude esquerdo e direito em radianos em função do comprimento do rio (m). Na sequência, o usuário deve pressionar o botão "2ª PARTE SOLVER". Este botão executa a macro que utiliza o complemento Solver do Excel para calcular a profundidade, em metros. Para saber se foi executado corretamente, os valores na coluna "Função" têm que ser iguais a 0 (zero). É importante que nas colunas "Função" sempre esteja inserida a Equação 4. Caso o usuário limpe a planilha, basta copiar a equação na coluna G e ajustar para os afluentes (ver Figura 10)

=((1/DISCRETIZAÇÃO!K5)\*((2\*DISCRETIZAÇÃO!I5+(HIDRÁULICA!H5/TAN(HIDRÁULICA! E5))+(HIDRÁULICA!H5/TAN(HIDRÁULICA!F5)))\*H5/2)\*(((2\*DISCRETIZAÇÃO!I5+(HIDRÁU LICA!H5/TAN(HIDRÁULICA!E5))+(HIDRÁULICA!H5/TAN(HIDRÁULICA!F5)))\*H5/2)/(H5/SI N(E5)+H5/SIN(F5)+DISCRETIZAÇÃO!I5)^(2/3))\*(DISCRETIZAÇÃO!H5\*(-1))^(1/2))-HIDRÁULICA!D5 (4)

A equação (4) representa a equação de Manning, onde os termos geométricos e hidráulicos são agrupados no mesmo lado da equação. Nesta equação, a única incógnita da função é a profundidade líquida. Ou seja, a função representada pelo termo geométrico ( $A \times Rh^{2/3}$ ) subtraído do termo hidráulico ( $Q \times \eta$ )/ $I_o^{1/2}$  é igual a zero (função igual a zero) (A é a seção transversal, em  $m^2$ ; Rh é o raio hidráulico, em m; Q é a vazão, em  $m^3/s$ ;  $\eta$  é o coeficiente de rugosidade de Manning,  $m^{-1/3}$ .s;  $I_o$  é a declividade longitudinal de fundo, m/m).

Na terceira parte dos cálculos hidráulicos, o usuário deve pressionar o botão "3ª PARTE DINÂMICA", a qual calcula as velocidades de escoamento (m/s), a tensão cisalhante (kPa), o nível de água (m) e o número de Froude.

Também são gerados gráficos representativos do fundo do canal (linha preta contínua), dos pontos amostrais do fundo do canal (círculos), da superfície líquida (linha azul contínua) e, por fim, da vazão ao longo do rio (linha vermelha tracejada), conforme ilustra a Figura 10. Ainda na Figura 10, focando-se no perfíl de vazão, observa-se que, nos pontos em que há lançamentos pontuais, a vazão aumenta de forma acentuada, enquanto que o crescimento da vazão segue

uma linha suave crescente nos trechos com lançamentos difusos. Estes resultados também são gerados para os tributários modelados.



Figura 10 – Janela da aba "Hidráulica"

Fonte: Autora (2017)

Após a geração dos resultados hidráulicos, o usuário irá para a próxima etapa pressionando o botão "PRÓXIMO" (ver Figura 10), que abrirá uma janela referente à aba "Concentrações pontuais".

#### 2.7 CONCENTRAÇÕES PONTUAIS

O procedimento para preenchimento dos dados de entrada na aba "Concentrações pontuais" é similar ao anteriormente descrito para "Vazões pontuais". De acordo com a Figura 11, nas células correspondentes a "Descrição", "Linj" (m), "Qaf" (m³/s) e "Vazão" (m³/s), a ferramenta computacional QUALI-TOOL busca automaticamente os valores anteriormente preenchidos na aba "Vazões pontuais" (verifique que os caracteres estão na cor azul) apenas com um click em "Importar dados de Q pontuais".

Como dado de entrada, o usuário deve apenas informar os valores das concentrações dos diversos parâmetros de qualidade de água (em mg/L), em todos os lançamentos pontuais, no curso de água principal e em seus tributários (ver Figura 11). Quando a vazão em questão for referente à uma retirada, não é necessário informar os dados de concentração desta.

Após a finalização de lançamento de entradas pontuais de concentração no rio principal e nos tributários, o usuário deverá ir para a próxima etapa, pressionando o botão "PRÓXIMO" (ver Figura 11), que abrirá uma janela para incluir os dados de entrada das concentrações difusas.

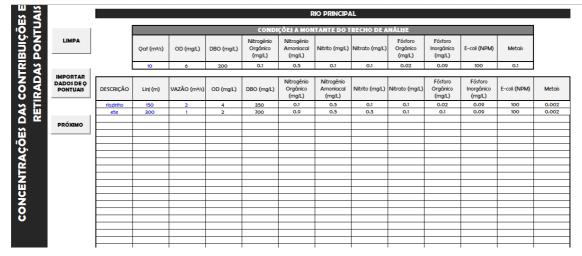


Figura 11 – Janela da aba "Concentrações pontuais"

Fonte: Autora (2017)

#### 2.8 CONCENTRAÇÕES DIFUSAS

O procedimento para preenchimento dos dados de entrada na aba "Concentrações difusas" é similar ao anteriormente descrito para "Vazões difusas". De acordo com a Figura 12, nas células correspondentes a "Descrição", "L<sub>inicial</sub>" (m), "L<sub>final</sub>" (m) e "Vazão" (m³/s), a ferramenta QUALI-TOOL busca automaticamente os valores anteriormente preenchidos na aba "Vazões difusas" (verifique que os caracteres estão na cor azul) apenas com um click em "Importar dados de Q difusas".

Figura 12 – Janela da aba "Concentrações difusas"

Fonte: Autora (2017)

Como dado de entrada, o usuário deve apenas informar os valores das concentrações dos diversos parâmetros de qualidade de água (em mg/L), em todos os lançamentos pontuais, no curso de água principal e em seus afluentes (ver Figura 12). Quando a vazão em questão for

referente à uma retirada difusa, não é necessário informar os dados de qualidade (concentrações).

Após a finalização de lançamento de entradas difusas de concentração em todos os trechos, o usuário irá para a próxima etapa, pressionando o botão "PRÓXIMO" (ver Figura 12), que abrirá uma janela para incluir os dados dos coeficientes.

#### 2.9 COEFICIENTES

Na aba "Coeficientes" (ver Figura 13) o usuário cadastra todos os coeficientes, velocidades de sedimentação e cargas por área pertencentes às equações matemáticas que representam o termo fonte na equação de difusão-advecção. A Tabela 2 relaciona os coeficientes, velocidades de sedimentação e cargas por área requeridos na ferramenta QUALI-TOOL, além do que traz os símbolos, sas unidades usuais e os parâmetros aos quais estão relacionados.

Tabela 2 - Coeficientes, velocidades de sedimentação e cargas por área utilizados em QUALI-TOOL

Descrição	Símbolo QUALI-TOOL	Unidade	Inserido na Modelagem
Coeficiente de reaeração	$K_2$	d-1	OD
Demanda bentônica de oxigênio	Sd'	g/m².d	OD
Coeficiente de decomposição da matéria orgânica carbonácea	Kd	d-1	DBO, OD
Velocidade de sedimentação da matéria orgânica carbonácea	$V_{SMO}$	m/d	DBO
Carga difusa de DBO sem incremento de vazão	$L_{rd}$	$g/m^2.d$	DBO
Velocidade de sedimentação do contaminante arbitrário	Vsca	m/d	Sólidos Suspensos
Ressurgimento de fundo dos contaminantes arbitrários	Sca	g/m².d	Sólidos Suspensos
Velocidade de sedimentação do nitrogênio orgânico	$V_{ m SNO}$	m/d	Nitrogênio orgânico
Coeficiente de conversão de nitrogênio orgânico em amônia	Koa	d-1	Nitrogênio orgânico e amônia
Coeficiente de conversão de amônia em nitrito	Kan	d <sup>-1</sup>	Amônia e nitrito
Coeficiente de conversão de nitrito a nitrato	Knn	$d^{-1}$	Nitrito e nitrato
Carga liberada de amônia pelo sedimento de fundo	Samon	g/m².d	Amônia
Velocidade de sedimentação do fósforo	$V_{SP}$	m/d	Fósforo
Coeficiente de decaimento do fósforo	$K_P$	d-1	Fósforo
Coeficiente de decaimento bacteriano	Kb	d <sup>-1</sup>	Coliformes fecais ( <i>E-coli</i> )
Coeficiente de decaimento dos metais	$K_{metal}$	d <sup>-1</sup>	Metais pesados
Carga liberada de metal pelo sedimento de fundo	Smetal	g/m².d	Metais pesados

Fonte: Autora (2017)

Figura 13 – Lançamento dos coeficientes

Fonte: Autora (2017)

De acordo com a Figura 13, o usuário pode utilizar um valor único em todo o trecho de rio estudado para a temperatura da água, coeficientes, velocidade de sedimentação e cargas por área. Pode também discretizar por trechos, devendo apenas informar a distância de início e final em que os valores são mantidos fixos.

Existem duas opções para alimentar os valores de temperatura da água, dos coeficientes, velocidade de sedimentação e cargas por área, que são:

a) quando a simulação do comportamento dos diversos parâmetros de qualidade da água for realizada a partir de coeficientes, velocidade de sedimentação e cargas por área da literatura, o usuário deve consultar o item ANEXOS, pressionando o botão "valores de referência" (ver Figura 14). O item ANEXOS está descrito em 2.11 neste manual. Lá o usuário pode escolher o valor do coeficiente que mais se adequa à característica hidráulica do trecho de curso de água estudado. Todos os coeficientes da literatura são baseados na temperatura ambiente (20°C). Neste caso, deve-se informar a temperatura da água (em °C) para que, internamente, a ferramenta QUALI-TOOL corrija os valores destes coeficientes (ver a Figura 14).

Com relação ao coeficiente de reaeração  $k_2$ , o usuário também tem a opção de utilizar as equações analíticas apresentadas na Tabela 4. Para isso, as células referentes ao coeficiente  $k_2$  devem ficar vazias (ver a Figura 13);

b) no caso da simulação em que se pretende calibrar os coeficientes, velocidades de sedimentação e cargas por área, o usuário deve introduzir os valores que proporcionam o melhor

ajuste entre os dados dos parâmetros simulados e os monitorados em campo. Neste caso, deve manter a temperatura da água fixa em 20°C em todos os trechos de rio.

VALORES DE REFERÊNCIA K1, Kd, Kr Sd' (diferentes tipos de fundo de rio) Tipo de fundo e localização Faixa de valores (g/m².d) 2 a 10 VOLTAR Lodo oriundo de esgoto municipais, a jusante do emissário

Lodo estuarino (=K,+K,) (=K,+K,) Fundo arenoso 0,2 a 1,0 0,5 0,60 - 1,35 S olos Minerais 0,05 a 0,1 mann (1972, citado por EPA, 1985, Thomann e Mueller, 1985, Chapra, 1997) Durso d'àgua recendo esgoto 0.30 - 0.40 0.40 - 0.80 0.05 - 0.25 0,45 - 1,05 0.30 - 0.45 0.00 - 0.150.30 - 0.60 r so d'agua recebendo efluente 030-050 Sd' (diferentes condições de fluxo) rso d'agua recebendo efluente 0,12 – 0,24 0,12 – 0,24 0.12 - 0.24 Caracteristicas das águas Condições de arso d'àgua com àguas limpas 0,08 - 0,20 0,08 - 0,20 0,08 - 0,20 0,08 - 0,20 0,08 - 0,20 Fluxo poluída poluída 1,00 0,20 0,50 1,00 Pesquisador Fórmula Faixa de aplicação aproximada Ránido 0.00 0.20 0.50 0,6m≤H<4,0m O'Connor & Dobbins (1958) 3 73 <sub>4</sub>0.5 H-1.5 0,05m/s ≤ v < 0,8m/s 0,6m ≤ H < 4,0m Fonte: Aguirre, 2000, citado por Costa Val, 2001 Churchill et al (1962) 5,0.v<sup>0,07</sup> H<sup>-1,67</sup>  $0.8 \text{m/s} \le v < 1.5 \text{m/s}$ K<sub>so</sub>, K<sub>oa</sub>, K<sub>an</sub>, K<sub>nn</sub>, S<sub>amon</sub> 0,05m/s ≤ v < 1,5m/s

Figura 14 - Valores de referência para os coeficientes.

Fonte: Autora (2017)

#### 2.10 CONCENTRAÇÕES (RESULTADOS)

A aba "Concentrações" ilustra os resultados qualitativos do estudo. Nas primeiras colunas são relacionados os coeficientes discretizados após o usuário pressionar o botão "IMPORTAR COEFICIENTES" (ver Figura 15). Nas colunas seguintes são relacionados os resultados das concentrações dos parâmetros de qualidade da água no rio principal e em seus afluentes. Para calcular os perfis dos diversos parâmetros, basta pressionar os botões dos ciclos de interesse no lado esquerdo da tela.

Acima da planilha com os resultados, tem-se os gráficos que relacionam, ao longo do comprimento do curso de água, os perfis de vazão e concentrações dos parâmetros na seguinte ordem: OD e Fósforo Total; DBO e Contaminantes Arbitrários; Nitrogênio e Suas Frações; Ecoli e Metais. O usuário pode escolher simular apenas alguns parâmetros, como OD e DBO por exemplo, apenas clicando nos botões 1 e 2 (ver os botões na Figura 15). A Figura 15 ainda traz os gráficos de OD/fósforo/vazão e DBO/Contaminante arbitrário/vazão em função da extensão do curso de água.

RESULTADOS QUALITATIVOS 8,00 80,00 7,00 70,00 6,00 5,00 ğ 50,00 4.00 1,50 40,00 40,00 30,00 3,00 2,00 20.00 3 FÓSFORO 1,00 10,00 nto (m) nto (m) E-COLI  $T^{(0)} \mid K_{2}(\vec{q}') \mid S_{6}(\vec{q}) | m^{2}_{c}(\vec{q}') \mid V_{SNO}(m(\vec{q}) \mid V_{SNO}(\vec{q}') \mid V_{SNO}(m(\vec{q}) \mid V_{SNO$ 

Figura 15 – Resultados, na ferramenta QUALI-TOOL, de OD e DBO mais vazão em função da extensão do curso de água

Fonte: Autora (2017)

#### **2.11 ANEXOS**

Nesta aba, redirecionada da aba 'coeficientes', o usuário pode consultar os valores dos coeficientes da literatura. As Tabelas 3 a 8 ilustram os valores de referência dos coeficientes a 20°C (VON SPERLING, 2005), que podem ser utilizados como referência

Na ferramenta QUALI-TOOL, o processo de sedimentação é modelado através da velocidade de sedimentação (Vs). Para encontrar essa variável, basta dividir a velocidade de sedimentação pela profundidade líquida no curso de água.

Tabela 3 - Valores típicos dos coeficientes de remoção de DBO (K<sub>1</sub>, K<sub>d</sub>, K<sub>s</sub> e K<sub>r</sub>) (base e, 20°C)

			Rios rasos			Rios profundo	s
Origem	K <sub>1</sub> (laborat.)	Decomp.	Sediment. K <sub>s</sub>	Remoção Kr (=Ks+Kd)	Decomp.	Sediment. K <sub>s</sub>	Remoção Kr (=Ks+Kd)
Curso d'água recendo esgoto bruto concentrado	0,35 - 0,45	0,50 1,00	0,10 - 0,35	0,60 – 1,35	0,35 - 0,50	0,05 - 0,20	0,40 - 0,70
Curso d'água recendo esgoto bruto de baixa concentação	0,30 - 0,40	0,40 - 0,80	0,05 - 0,25	0,45 – 1,05	0,30 - 0,45	0,00 - 0,15	0,30 - 0,60
Curso d'água recebendo efluente primário	0,30 - 0,40	0,40 - 0,80	0,05 - 0,10	0,45 – 0,90	0,30 - 0,45	0,00 - 0,05	0,30 - 0,50
Curso d'água recebendo efluente secundário	0,12 - 0,24	0,12 - 0,24	-	0,12 - 0,24	0,12 - 0,24	-	0,12 – 0,24
Curso d'água com águas limpas	0,08 - 0,20	0,08 - 0,20	-	0,08 - 0,20	0,08 - 0,20	-	0,08 - 0,20

Fonte: Von Sperling, 2005

Fórmula	Faixa de aplicação aproximada
2 72 -05 11-15	$0.6 \text{m} \le \text{H} < 4.0 \text{m}$
3,/3.V <sup>6,5</sup> .H <sup>1,5</sup>	$0.05  \text{m/s} \le v < 0.8  \text{m/s}$
5 O - 0 97 II-1 67	$0.6m \le H < 4.0m$
3,0.ү ч.п	$0.8\text{m/s} \leq v \leq 1.5\text{m/s}$
5 2 - 0 67 II-1 85	$0.1 \text{m} \le \text{H} < 0.6 \text{m}$
3,3.V°,°'.H 1,00	$0.05 \text{m/s} \le v < 1.5 \text{m/s}$
	Fórmula  3,73.v <sup>0,5</sup> .H <sup>-1,5</sup> 5,0.v <sup>0,97</sup> .H <sup>-1,67</sup> 5,3.v <sup>0,67</sup> .H <sup>-1,85</sup>

#### Notas:

v: velocidade do curso d'água (m/s); H: altura da lâmina d'água (m)

Faixa de aplicabilidade adaptadas e modificadas de Covar (apud EPA, 1985), para efeito de simplicidade:

Tributários (Q <  $10m^3/s$  – equação de Owens et al):  $K_2 = 15,98.Q^{-0,60}$ 

Rios principais (Q >  $10\text{m}^3/\text{s}$  – equação de O'Connor):  $K_2 = 20,74.Q^{-0,42}$ 

Fonte: Von Sperling, 2005

Tabela 5 - Valores do coeficiente de demanda de oxigênio pelo sedimento S<sub>d</sub>'para diferentes tipos de fundo de rio (20°C)

T' 1. C 1 1 1 7 .	Faixa de valores	Valor médio
Tipo de fundo e localização	$(g/m^2.d)$	$(g/m^2.d)$
Lodo oriundo de esgoto municipais, próximos ao emissário	2 a 10	4
Lodo oriundo de esgoto municipais, a jusante do emissário	1 a 2	1,5
Lodo estuarino	1 a 2	1,5
Fundo arenoso	0,2 a 1,0	0,5
Solos Minerais	0,05 a 0,1	0,07

Fonte: Thomann (1972, citado por EPA, 1985, Thomann e Mueller, 1985, Chapra, 1997)

Fonte: Von Sperling, 2005

Tabela 6 - Valores de Referência da demanda de oxigênio pelo sedimento  $S_d$ ' para diferentes condições de fluxo do rio (20°C)

Candiazas da	Características das águas						
Condições de _ Fluxo	Natural	Moderadamente poluída	Fortemente poluída				
Remanso	0,50	0,70	1,00				
Lento	0,20	0,50	1,00				
Rápido	0,00	0,20	0,50				
Corredeira	0,00	0,00	0,00				

Fonte: Von Sperling, 2005

Tabela 7 - Valores de referência para a modelagem do nitrogênio (20°C)

Símbolo	Descrição	Unidade	Valores usuais do Coeficiente (20°C)	Coeficiente de temperatura θ (adimensional)	
			Remansos: 0,10		
			Rios lentos com águas naturais a moderadamente poluídas: 0,05		
	Coof Do codimento 2 de N		Rios lentos com águas fortemente poluídas: 0,10		
Kso	Coef. De sedimentação do N orgânico	d <sup>-1</sup>	Rios rápidos com águas naturais: 0,020	1,024	
	C		Rios rápidos com águas moderadamente poluídas: 0,050		
			Rios Rápidos com águas fortemente poluídas: 0,10	-	
			Corredeiras: 0,00		
Koa	Coef. De conversão do N orgânico a amônia	d <sup>-1</sup>	0,20 a 0,25	1,047	
Kan	Coef. De conversão da amônia a nitrito	d <sup>-1</sup>	0,15 a 0,25	1,080	
Knn	Coef. De conversão de nitrito	d <sup>-1</sup>	Cursos d'água profundos: 0,10 a 0,50	1,047	
Kiiii	a nitrato	u	Cursos d'água rados: 0,20 a 1,00	1,047	
Samon	Fluxo de liberação de amônia pelo sedimento de fundo	g/m².d	0,00 a 0,50 (menores valores para rios limpos e rápidos)	1,074	
fnitr	Fator de correção do coef. De nitritficação em função do OD	-	fnitr = 1 - e-KnitrOD.OD	-	
KnitrOD	Coef. De inibição da nitrificação por baixo OD	L/mg	0.60	-	
RO <sub>2</sub> Amon	Relação entre o oxigênio consumido por cada unidade de amônia oxidada a nitrito	mgO <sub>2</sub> /mgN <sub>amon</sub>	3.20	-	
RO <sub>2</sub> nitr	Relação entre o oxigênio consumido por cada unidade de nitrito oxidado a nitrato	mgO <sub>2</sub> /mgN <sub>nitri</sub>	1.10	-	

Fonte: Autora (2016)

Tabela 8 Valores de referência da modelagem do Fósforo (20°C)

$K_{spo}$ Coef. De sedimentação do P $d^{-1}$ 0,02 a 0.05 1,024	Símbolo	Descrição	Unidade	Valores Intermediários do Coeficiente	Coeficiente de temperatura θ (adimensional)
	Kspo		d-1	0,02 a 0.05	1,024
K <sub>oi</sub> Coef. De conversão do P orgânico a P inorgânico d-1 0,2 a 0,3 1,047	Koi		d <sup>-1</sup>	0,2 a 0,3	1,047

Fonte: Von Sperling, 2005

#### 3 FÓRMULAS UTILIZADAS

Nesta seção verifica-se as fórmulas utilizadas nos cálculos quantitativos (hidráulicos) e qualitativos (concentrações).

#### 3.1 HIDRÁULICA DE RIOS

#### 3.1.1 Cálculo da vazão

Na ferramenta QUALI-TOOL, o usuário fornece os dados de entrada de vazão, à montante do trecho de estudo e dos lançamentos no rio e em seus tributários. A ferramenta faz o balanço hídrico em cada trecho discretizado, baseado na análise das distâncias. Se a distância do determinado lançamento for maior que a distância do trecho discretizado em análise, as vazões não são acumuladas. Caso contrário, a ferramenta soma a vazão do lançamento à vazão do rio naquele trecho.

#### 3.1.2 Nível líquido

A equação de Manning, descrita na Equação 5, considera o escoamento permanente e uniforme, partindo-se do princípio de que não existem variações da seção transversal, da declividade de fundo e da rugosidade de fundo e das paredes ao longo do curso de água em cada seção descrita ao longo do tempo.

$$Q = \frac{1}{\eta} \times A_{m} \times R_{h}^{2/3} \times S^{1/2}$$
 (5)

Para a resolução na ferramenta QUALI-TOOL, os termos geométricos e hidráulicos são agrupados no mesmo lado da equação. Nesta equação, a única incógnita da função é a profundidade líquida. Ou seja, a função representada pelo termo geométrico ( $A \times Rh^{2/3}$ ) subtraído do termo hidráulico ( $Q \times \eta$ )/ $I_o^{1/2}$  é igual a zero (função igual a zero) ( $A \times Rh^{2/3}$ ) transversal, em m²; Rh é o raio hidráulico, em m; Q é a vazão, em m³/s;  $\eta$  é o coeficiente de rugosidade de Manning, m-1/3.s;  $I_o$  é a declividade longitudinal de fundo, m/m).

#### 3.1.3 Velocidade média do escoamento

A velocidade média do escoamento é calculada através da equação da continuidade, conforme ilustra a equação (6).

$$V = Q / A \tag{6}$$

Na qual: V é a velocidade média em m/s; Q é a vazão em m³/s; A é a área molhada em m².

#### 3.1.4 Tensão cisalhante (τ)

A tensão cisalhante é a tensão devida à viscosidade da água nas paredes laterais e no fundo do canal e é calculada pela equação (7).

$$\tau = \gamma \times R_h \times S_0 \tag{7}$$

Na qual:  $\gamma$  é o peso específico da água em N/m³,  $R_h$  é o raio hidráulico em metros e  $S_0$  é a declividade do fundo do canal em m/m.

#### 3.1.5 Número de Froude Fr

O número de Froude desempenha importante papel no estudo dos canais, permitindo definir os regimes de escoamento (subcrítico, supercrítico e crítico) e é calculado por meio da equação (8).

O número de Froude é calculado através da Equação 7.

$$Fr = \frac{V}{\sqrt{g^{\times}h}} \tag{8}$$

Na qual: V é a velocidade média do escoamento na seção (m/s); g é a aceleração da gravidade (m/s²); h é a profundidade na seção (m).

#### 3.2 EQUAÇÃO DE MISTURA

No início do segmento discretizado deve-se considerar a mistura entre o lançamento (esgoto, tributários, etc) e o rio estudado, cuja concentração da mistura é calculada por meio da equação (9).

$$C_{j} = \frac{C_{M} \times Q_{M} + C_{L} \times Q_{L}}{Q_{M} + Q_{I}}$$

$$(9)$$

Na qual:  $C_j$  é a concentração de jusante ou da mistura (mg/L);  $C_M$  é a concentração de montante (mg/L);  $Q_M$  é a vazão de montante (m³/s);  $C_L$  é a concentração do lançamento (mg/L);  $Q_L$  é a vazão do lançamento (m³/s).

#### 3.3 EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

A fim de simular a dispersão, bem como quantificar e acompanhar a evolução ao longo do tempo dos parâmetros nos corpos hídricos, é utilizada a equação de difusão-advecção (COX, 2003 e BENEDINI, 2011), conforme ilustra a Equação (10).

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \pm \text{Fonte}$$
 (10)

Na equação (10), C é a concentração do parâmetro no tempo t; t é o tempo decorrido desde a zona de mistura entre o contaminante e o meio líquido (dia);  $D_x$ ,  $D_y$  e  $D_z$  correspondem aos coeficientes de difusão turbulenta nas respectivas variáveis espaciais; u, v e w são as componentes do vetor velocidade nas direções x, y e z, respectivamente; Fonte é o termo fonte-sumidouro.

A equação considera os fenômenos de difusão (dispersão do poluente devido à diferença de concentração existente entre a carga poluidora e o corpo hídrico), advecção (transporte do poluente devido ao movimento natural da água do curso hídrico) e de decaimento ou acúmulo da massa de um parâmetro de qualidade da água ao longo do tempo, ocasionado por processos físicos, químicos e biológicos (CHAPRA, 1997; SILVINO, 2008).

Na modelagem de qualidade da água em ambiente lótico, algumas simplificações na equação de difusão-advecção são consideradas para agilizar a simulação, tais como: considera-se escoamento permanente (estado estacionário); considera-se escoamento unidirecional – apenas a direção longitudinal x (a concentração de qualquer poluente é constante nas direções y e z); o termo difusivo pode ser desprezado em ambiente lótico (CHAPRA, 1997; SILVINO, 2008; SALLA et al., 2014). Diante das simplificações, a Equação 10 é reescrita na forma da Equação 11.

$$u\frac{\partial c}{\partial x} = \pm Fonte \tag{11}$$

A solução numérica, por diferença finita, da Equação 11, leva a Equação 12.

$$C_{n+1} = C_n \pm Fonte (t_{n+1} - t_n)$$
(12)

Na equação 12:  $C_{n+1}$  representa a concentração do parâmetro no tempo  $t_{n+1}$ ;  $C_n$  representa a concentração do parâmetro no tempo  $t_n$ .

As representações matemáticas do termo Fonte (ΣFi) para a simulação dos parâmetros OD, DBO, nitrogênio orgânico (NO), nitrogênio amoniacal (NH<sub>3</sub>), nitrito (NO<sub>2</sub><sup>-</sup>), nitrato (NO<sub>3</sub><sup>-</sup>), fósforo total (P<sub>total</sub>), coliformes (*E.coli*), metais pesados e contaminantes arbitrários (CA) são demonstradas nas equações (13) a (22), respectivamente.

$$\Sigma F_{OD} = +k_2 \times 1,024^{(T-20)} \times (OD_{sat} - OD) - k_d \times 1,047^{(T-20)} \times DBO - R_{02-amonia} \times f_{nitr} \times k_{an} \times (13)$$

$$1,080^{(T-20)} \times NH_3 - S_d/h$$

$$\Sigma F_{DBO} = -k_d \times 1,047^{(T-20)} \times DBO - (VS_{MO}/h) \times DBO + L_{difuso}/h$$
(14)

$$\Sigma F_{NO} = -k_{oa} \times 1,047^{(T-20)} \times N_{org} - (VS_{NO}/h) \times N_{org}$$
(15)

$$\Sigma F_{NH3} = + k_{oa} \times 1,047^{(T-20)} \times N_{org} - R_{O2-amonia} \times f_{nitr} \times k_{an} \times 1,080^{(T-20)} \times NH_3 + S_{amonia}/h$$
(16)

$$\Sigma F_{NO2}^{-} = + R_{O2\text{-amonia}} \times f_{nitr} \times k_{an} \times 1,080^{(T-20)} \times NH_3 - k_{nn} \times 1,047^{(T-20)} \times NO_2^{-}$$
(17)

$$\Sigma F_{NO3}^{-} = + k_{nn} \times 1,047^{(T-20)} \times NO_{2}^{-}$$
(18)

$$\Sigma F_{Ptotal} = -k_P \times 1,047^{(T-20)} \times P_{total} - (VS_P/h) \times P_{total}$$
(19)

$$\Sigma F_{E.coli} = -k_b \times 1,070^{(T-20)} \times E.coli$$
(20)

$$\sum F_{\text{metal } i} = -k_{\text{metal } i} \times \text{Metal}_{i} + S_{\text{metal } i} / h$$
(21)

$$\Sigma F_{CA} = -(VS_{CA}/h) \times CA + S_{CA}/h \tag{22}$$

Nas equações (13) a (22): OD é a concentração de oxigênio dissolvido, em mg/L; ODsat é a concentração de saturação de oxigênio dissolvido, em mg/L; DBO é a demanda bioquímica de oxigênio, em mg/L; NO é a concentração de nitrogênio orgânico, em mg/L; NH3 é a concentração de nitrogênio amoniacal, em mg/L; NO2- é a concentração de nitrito, em mg/L; NO3- é a concentração de nitrato, em mg/L; Ptotal é a concentração de fósforo total (mg/L); E.coli é a concentração de coliformes, em NMP/100 mL; Metali é a concentração de qualquer metal (cádmio, cobre, chumbo, zinco, cromo, alumínio, cobalto, manganês, níquel, ferro e prata), em mg/L; CA é a concentração de contaminantes arbitrários (sólidos suspensos, compostos tóxicos, entre outros), em mg/L; k<sub>2</sub> é o coeficiente de reaeração, em dia-1; kd é o

coeficiente de decomposição da matéria orgânica carbonácea no rio, em dia-1; kan é o coeficiente de conversão de amônia em nitrito, em dia-1; koa é o coeficiente de conversão de nitrogênio orgânico em amônia, em dia-1; knn é o coeficiente de conversão de nitrito em nitrato, em dia-1; kP representa a constante de degradação do fósforo total (dia-1); kb é o coeficiente de decaimento de coliforme, em dia-1; kmetal i é o coeficiente de decaimento de qualquer metal i, em dia-1; VSMO é a velocidade de sedimentação da matéria orgânica carbonácea, em m/dia; VSNO é a velocidade de sedimentação do nitrogênio orgânico, em m/dia; VSP é a velocidade de sedimentação do contaminante arbitrário qualquer (sólidos suspensos, tóxicos, etc) (m/dia); Sd é a demanda de fundo de oxigênio dissolvido no rio, em gO2/m².dia; Ldifuso é a carga difusa de DBO, em g/m².dia; Samônia é o ressurgimento de fundo da amônia, em g/m².dia; Smetal i é o ressurgimento de fundo de qualquer metal i, em g/m².dia; SCA é o ressurgimento de fundo de contaminante arbitrário, em g/m².dia; T é a temperatura da água, em °C; h é a profundidade líquida do rio, em metros; RO2-amonia é o consumo de oxigênio para oxidação da amônia, em mgO2cons/mgNH3oxid; fnitr é o fator de nitrificação, adimensional.

Os parâmetros (coeficientes) utilizados nas equações (13) a 22 podem ser obtidas na literatura e estão relacionados no item 2.11 (Anexos).

A representação matemática do comportamento de OD (ver equação 13) não traz as influências da fotossíntese e respiração (em gO<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>.dia), em função da ferramenta QUALI-TOOL ter sido desenvolvida para ambiente lótico.

#### 3.4 CASOS PARTICULARES

O foco deste item está nas situações em que o usuário "foge" da simulação padrão da ferramenta QUALI-TOOL.

#### 3.4.1 Caso o usuário não deseja simular algum parâmetro

Caso o usuário não deseje simular algum parâmetro (tais como ciclo do fósforo, ciclo dos metais, ciclo do nitrogênio, etc), basta que o mesmo não insira dados de concentração e coeficientes para esses parâmetros. Em resultados, basta que o mesmo não clique nos botões das modelagens dos parâmetros. Porém, o ciclo do OD é dependendo do ciclo da DBO e Nitrogênio, então se o usuário desejar uma modelagem mais próxima da realidade para OD deve-se modelar todos os itens.

#### 3.4.2 Caso o usuário não possua dados de topologia (coordenadas e elevações)

Neste caso deverá definir trechos de rios "fictícios", no qual cada trecho possua a declividade e comprimento desejados. As Figuras (18) e (19) ilustram esse processo. Lembra-se que devem ser inseridas, no mínimo, duas coordenadas (inicial e final) para que a ferramenta consiga calcular a declividade do trecho e o comprimento total. É importante também que as coordenadas X e Y dos pontos não sejam iguais.

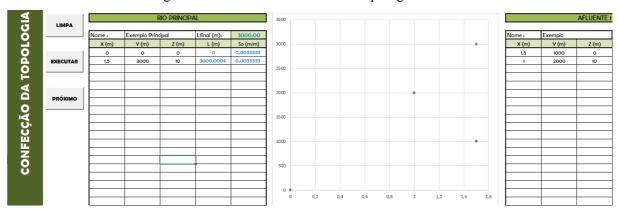


Figura 16 – Como inserir dados de topologia fictícios.

Fonte: Autora (2017)

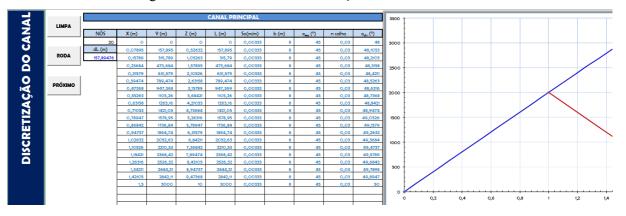


Figura 17 – Resultado da discretização de um rio "fictício"

Fonte: Autora (2017)

#### 4 CONSIDERAÇÕES GERAIS

Algumas considerações e dicas são feitas para evitar erros durante a simulação com a ferramenta QUALI-TOOL.

#### De uma forma geral:

I. Sempre que for iniciar um novo projeto, limpar todas as células em todas as planilhas;

II. Nunca inserir novas colunas ou linhas antes dos cabeçalhos de resultados, pois esta ação fará com que a programação do VBA se altere e resultará em erros durante a simulação ou até mesmo nas concentrações finais.

#### Na seção Topologia:

- Cuidado para não lançar duas vezes a mesma coordenada. Caso isso ocorra, irá se mostrar o erro "OVERFLOW". Verifique as coordenadas lançadas e apague as duplicadas antes de executar novamente;
- II. Se em seu modelo numérico do terreno ou captura de coordenadas ocorrerem declividades positivas (rio acima), na seção "Hidráulica" podem ocorrer erros também.
   É importante conferir esses valores.

#### Na seção Discretização:

- I. Não esqueça de inserir o número de células desejadas para a simulação;
- II. A fim de não tornar a ferramenta muito lenta, o limite máximo de nós na ferramenta QUALI-TOOL é 10.000.

Nas seções "Vazões Pontuais e Vazões Difusas":

- I. Em casos de vazões de retirada (demanda), não esquecer de colocar o sinal negativo.
- II. Não relacione as vazões pontuais e difusas dos afluentes no rio principal. A própria ferramenta foi programado para lançar esses dados a partir dos dados de coordenadas e comprimentos.

Nas seções "Concentrações Pontuais e Concentrações Difusas"

- I. Para que não ocorram divergências, ao iniciar, pressione a célula de importar as vazões das planilhas anteriores. Desta forma, o usuário não esquecerá de relacionar nenhum lançamento no cálculo das concentrações;
- II. Em caso de vazões de retirada (demanda), não inserir valores de concentrações de qualquer parâmetro. Ou seja, deixar as células de concentrações em branco.

#### Na seção Concentrações:

I. Para que a modelagem do OD resulte em simulações mais apropriadas, deve-se realizar a modelagem da DBO e do Nitrogênio antes, visto que o balanço de OD depende da degradação da MO e da nitrificação, já que ambas consomem OD no processo.

#### **5 PROCESSOS MODELADOS E CONSTITUINTES**

#### **5.1 PROCESSOS MODELADOS**

Os processos modelados na ferramenta QUALI-TOOL são decomposição, decaimento, sedimentação, ressurgimento de fundo, reaeração e conversões (nitrificação e amonificação). O esquema geral dos processos físicos e bioquímicos aos quais os parâmetros de qualidade da água estão sujeitos, além das interações entre os próprios parâmetros, são apresentadas na Figura 20.

DBO NO CARGA DIFUSA SEDIMENTAÇÃO SEDIMENTAÇÃO DECOMPOSIÇÃO DA M.O. AMONIFICAÇÃO REAERAÇÃO  $NH_3$ LIBERAÇÃO DE AMÔNIA NITRIFICAÇÃO  $P_{TOT}$ DEMANDA  $NO_3$ SEDIMENTAÇÃO DECAIMENTO CONTAMINANTE FUNDO E-COLI METAIS MASSA LÍQUIDA RESSURGIMENTO RESSURGIMENTO DECAIMENTO PERDA SEDIMENTAÇÃO PELOS SERES VIVOS GANHO / RETORNO

Figura 18 – Esquema dos processos físicos e bioquímicos e interações dos parâmetros

Fonte: Adaptado de Salla et al. (2014)

A sequência traz uma descrição sucinta de cada parâmetro de qualidade da água.

#### **5.2 CONSTITUINTES**

Os constituintes abordados na ferramenta QUALI-TOOL são: Matéria Orgânica (DBO), Oxigênio Dissolvido (OD), nitrogênio e suas frações (orgânico, amoniacal e nitrato), fósforo total, contaminantes arbitrários (como sólidos suspensos, compostos tóxicos, etc.), *E-coli* e metais pesados.

#### 5.2.1 Matéria orgânica carbonácea

Os processos envolvidos na degradação da matéria orgânica, conforme detalhado na Equação (14) e ilustrado na Figura 20, são, respectivamente, de decomposição pelas bactérias, sedimentação da parcela adsorvida às partículas sólidas em suspensão e aporte das cargas difusas de DBO sem vazão (é o ressurgimento de fundo).

#### 5.2.2 Nitrogênio orgânico e suas frações

Os processos envolvidos na degradação do nitrogênio orgânico, conforme detalhados nas Equações 15 a 18 e ilustrado na Figura 20, são, respectivamente sedimentação do nitrogênio orgânico adsorvido em material particulado, conversão do nitrogênio orgânico a amônia, oxidação da amônia a nitrito e de nitrito a nitrato além de ressurgimento de fundo da amônia.

#### 5.2.3 Oxigênio Dissolvido

Os processos envolvidos na acumulação de oxigênio dissolvido, conforme detalhado na Equação 13 e ilustrado na Figura 20, são, respectivamente reaeração devido ao intercâmbio de moléculas da fase líquida para gasosa e vice-versa, decomposição da matéria orgânica (na qual há consumo de OD), demanda bentônica de OD e nitrificação (processo de conversão da amônia a nitrato, na qual há consumo de OD).

#### 5.2.4 Fósforo Total

Os processos envolvidos no balanço do fósforo, conforme detalhado na Equação 19 e ilustrado na Figura 20, são, respectivamente, decaimento do fósforo total (envolve a conversão da parcela orgânica para a inorgânica e a assimilação da parcela inorgânica pelos protistas e algas) e a sedimentação do fósforo (envolve a sedimentação da parcela orgânica).

#### 5.2.5 Escheria Coli

O processo envolvido no ciclo do *E-coli*, conforme detalhado na Equação 20 e ilustrado na Figura 20, é o decaimento das bactérias *E-coli*.

#### 5.2.6 Metais pesados

Os processos envolvidos no balanço dos metais pesados, conforme detalhado na Equação 21 e ilustrado na Figura 20, são, respectivamente, assimilação pelos seres vivos, sedimentação de metais adsorvidos ao material particulado e ressurgimento de fundo dos metais.

#### 5.2.7 Contaminantes Arbitrários (sólidos suspensos e compostos tóxicos)

Os processos envolvidos no balanço dos contaminantes arbitrários, conforme detalhado na Equação 22 e ilustrado na Figura 20, são sedimentação e ressurgimento de fundo, respectivamente.

#### 6 UNIDADES DE ENTRADA

As Tabela 9 e 10 apresentam os parâmetros e variáveis utilizados na ferramenta QUALI-TOOL, com seus símbolos e unidades. É importante ressaltar que os coeficientes utilizados estão relacionados na Tabela 2.

Tabela 9 – Unidades de entrada na ferramenta QUALI-TOOL em Topologia e Seções Transversais

Parâmetro / Variável	Símbolo	Unidade	
Coordenada Leste-Oeste	X	Metros (m)	
Coordenada Norte-Sul	Y	Metros (m)	
Elevação / Altitude	Z	Metros (m)	
Comprimento do rio	L	Metros (m)	
Declividade de fundo	So	Metros / Metros (m/m)	
Distância da mudança de seção transversal	Ls	Metros (m)	
Base menor da seção transversal	b	Metros (m)	
Ângulo de inclinação esquerdo do talude	$lpha_{ m esq}$	Graus (°)	
Ângulo de inclinação direito do talude	$\alpha_{ m dir}$	Graus (°)	
Rugosidade de manning da calha	η	-	

Fonte: Autora (2017)

Tabela 10 – Unidades de entrada na ferramenta QUALI-TOOL em Hidráulica e Concentrações

Vazão afluente do trecho	$Q_{\mathrm{af}}$	
Comprimento de Injeção / Retirada	L <sub>inj</sub>	M
Vazão de lançamento ou retirada pontual	Qp	m³/s
Comprimento de injeção ou retirada difusa inicial	Linicial	M
Comprimento de injeção ou retirada difusa final	L <sub>final</sub>	M
Vazão de retirada ou injeção difusa	qd	m³/s
Velocidade do curso d'água	V	M
Vazão total do curso d'água	Q	m³/s
Velocidade de cisalhamento	u*	m/s
Tensão de cisalhamento	$ au_{ m o}$	Pa
Nível d'água	NA	M
Número de Froude	Fr	-
Concentração de Oxigênio Dissolvido	OD	mg/L
Concentração de DBO	DBO	mg/L
Concentração de Contaminante arbitrátio	CA	mg/L
Concentração de Nitrogênio Orgânico	NO	mg/L
Concentração de Nitrogênio Amoniacal	N <sub>amon</sub>	mg/L
Concentração de Nitrato	Nitrato	mg/L
Concentração de Fósforo Total	P <sub>TOT</sub>	mg/L
Concentração de E-coli	E-coli	mg/L
Concentração de Metais Pesados	Metais	mg/L
Temperatura	T	°C

Fonte: Autora (2017)

#### REFERÊNCIAS

AZEVEDO NETTO, J. M., et alli. - "Manual de Hidráulica", Ed. Edgard Blucher Ltda, 8ª Edição, São Paulo, 1998.

CHAPRA, S. C. Surface water-quality modeling. WCB – McGraw-Hill. Boston, 844p. 1997.

FLOOD MANAGER. University of Technology Hamburg. Disponível em: <a href="http://daad.wb.tu-harburg.de/?id=1518">http://daad.wb.tu-harburg.de/?id=1518</a> Acesso em 15/12/2016.

GOOGLE. Google Earth. Version 7.1.8.3036. 2017. Local Rio Uberabinha Uberlândia/MG. Acesso em 17 de setembro de 2016.

PORTO, Rodrigo de Melo. Hidráulica Básica. 1.ed. São Carlos: EESC/USP, 1998. 540 p.

QGIS. Open Source Geospatial Foundation (OSGeo). Version 2.6.1 2017. Acesso em 17 de setembro de 2016.

SALLA, M. R. et al. Sistema de Suporte de Decisão em recursos hídricos na bacia hidrográfica do Rio Uberabinha, Minas Gerais - PUBLICAÇÃO EM JANEIRO DE 2014. Revista Brasileira de Recursos Hídricos, v. 19, p. 189-204, 2014.

SILVINO, A. N. O. *Avaliação e modelagem da qualidade da água da bacia do rio Coxipó, no município de Cuiabá - MT*. 173f. Dissertação (Mestrado em Física e Meio Ambiente) - Universidade Federal do Mato Grosso, Cuiabá, 2008.

VON SPERLING, M. *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos*. 452p. 3. ed. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental - UFMG, 2005. (Princípios do tratamento biológico de águas residuárias. Vol. 1)