

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

DANIELI MARA FERREIRA

SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA E DE QUALIDADE DA ÁGUA EM RIOS: IMPACTO
PARA OS INSTRUMENTOS DE GESTÃO DE RECURSOS HÍDRICOS

CURITIBA

2015

DANIELI MARA FERREIRA

SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA E DE QUALIDADE DA ÁGUA EM RIOS: IMPACTO
PARA OS INSTRUMENTOS DE GESTÃO DE RECURSOS HÍDRICOS

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental da Universidade Federal do Paraná, como requisito para obtenção do grau de Mestre.

Orientador: Prof. Cristovão V. S. Fernandes, Ph.D.

Co-Orientador: Prof. Eloy Kaviski, Dr.

CURITIBA

2015

F383s

Ferreira, Danieli Mara

Simulação hidrodinâmica e de qualidade da água em rios : impacto para os instrumentos de gestão de recursos hídricos/ Danieli Mara Ferreira. – Curitiba, 2015.

126 f. : il. color. ; 30 cm.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, 2015.

Orientador: Cristovão V. S. Fernandes – Co-orientador: Eloy Kaviski.

Bibliografia: p. 91-100.

1. Qualidade da água - Modelos matemáticos. 2. Saint-Venant, Equações de. 3. Recursos hídricos - Administração. 4. Iguaçu, Rio (PR). I. Universidade Federal do Paraná. II. Fernandes, Cristovão V. S.. III. Kaviski, Eloy. IV. Título.

CDD: 627.1250285



TERMO DE APROVAÇÃO

DANIELI MARA FERREIRA

“Simulação Hidrodinâmica e de Qualidade da Água em Rios: Impacto para os Instrumentos de Gestão de Recursos Hídricos”.

Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental do Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, pela comissão formada pelos professores:

PRESIDENTE:

Cristovão Vicente Scapulatempo Fernandes, Dr.
Universidade Federal do Paraná
Orientador

Eloy Kaviski, Dr
Universidade Federal do Paraná
Co-Orientador

MEMBROS:

Michael Mannich, Dr
Universidade Federal do Paraná

Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha, Dr
Universidade Federal do Paraná

André Schardong
Universidade de São Paulo

Curitiba, 27 de março de 2015.

Agradecimentos

Gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos inicialmente ao professor Cristovão V. S. Fernandes, pela orientação ao longo deste trabalho, pela motivação e pela confiança depositada em mim.

Agradeço ao professor Eloy Kaviski pelas contribuições para a melhoria deste estudo, pela sua didática e pela fundamental ajuda em solucionar dúvidas.

Agradeço também a banca avaliadora, em especial ao professor Michael Mannich, por suas sugestões e por sempre demonstrar interesse por esta pesquisa.

Aos colegas da sala de estudos, pelo apoio e amizade nos últimos dois anos: Ana Paula, Bruna, Carla, João, Helô, Carol, Marcelo e Julio. Agradeço aos professores e colaboradores do programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental (PPGERHA), e ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Finalmente agradeço aos meus pais, Tânia e José, demais familiares e amigos, pela compreensão e apoio incondicional.

RESUMO

Modelos de qualidade de água têm sido utilizados como ferramenta na gestão de recursos hídricos de bacias hidrográficas em diversos países. Em bacias com processo de urbanização intensa, usualmente tem-se empregado modelos com hipótese de regime permanente, em que a variação temporal dos parâmetros envolvidos não é considerada. Por outro lado, devido à dinâmica desses ambientes, uma análise em estado não-permanente pode oferecer flexibilidade e uma distinta perspectiva para o gerenciamento dos sistemas, em especial quanto à aplicação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos. Essa abordagem permite descrever o comportamento de corpos hídricos de forma criteriosa, e associar as questões de qualidade e quantidade de água. Esta pesquisa busca contribuir para esse entendimento no rio Iguaçu, localizado na Região Metropolitana de Curitiba, e indicar quais os possíveis impactos de uma mudança de modelagem permanente para não-permanente como forma de gerir os usos da água. Para atingir esses objetivos foi desenvolvido um modelo de qualidade de água em regime transiente (SIHQAL), através de métodos de diferenças finitas explícitas para solução das equações de Saint-Venant e de transporte. As simulações foram realizadas para as variáveis demanda bioquímica de oxigênio (DBO) e oxigênio dissolvido (OD), utilizados como parâmetros para indicar a qualidade ambiental do sistema. Os resultados do modelo transiente foram comparados com os do permanente, através do conceito de curva de permanência para qualidade de água. Foi observado que as duas abordagens podem diferir, por exemplo, em relação à classificação de enquadramento do trecho analisado. No desenvolvimento dos modelos ainda destacou-se a diferença de calibração para os parâmetros cinéticos. Em condições de estado estacionário, determinado conjunto de coeficientes de reação pode sobrepor os reais efeitos da advecção sobre a distribuição de poluentes no canal. As simulações hidrodinâmicas para qualidade de água ainda chamam atenção aos planos atuais de monitoramento do rio Iguaçu, que devem contemplar as variações de concentração ao longo do tempo.

Palavras-chave: Modelo de qualidade de água. Equações de Saint-Venant. Gestão de recursos hídricos. Rio Iguaçu.

ABSTRACT

Water quality models have been used as a tool for water resources management in watersheds in many countries. In highly urbanized basins, usually the steady state hypothesis, wherein the temporal variability of the parameters involved is not considered, has been considered as the main basis for modeling approach. On the other hand, due to the dynamics of these environments, an unsteady state analysis can offer flexibility and a different perspective to the management in the basin, especially regarding the implementation of water resources management tools. This approach allows one to describe the water bodies behavior carefully, and link water quality and quantity specific issues. This research aims to contribute to this understanding on the Iguaçu river, located in the Metropolitan Region of Curitiba, and indicate the possible impacts of a change from steady regime modeling to unsteady as a way to manage the water uses. To achieve these goals it was developed a water quality model considering unsteady state analysis (SIHQQUAL), through explicit finite difference methods for the solution of the Saint-Venant and the transport equations. The simulations were performed for biochemical oxygen demand (BOD) and dissolved oxygen (DO), used as parameters to indicate the environmental quality of the system. The results of the transient model were compared with those of the steady state analysis, through the concept of frequency curve for water quality. It was observed that the two approaches may produce different results, for example, in terms of the classification framework for the analyzed reach. In the development of the models it was also highlighted the calibration difference to the kinetic parameters. Under stationary state conditions, a given set of reaction coefficients can overlay the actual effect of advection over the distribution of pollutants in the channel. The hydrodynamic simulations for water quality also call attention to the monitoring plans of the Iguaçu river, that should include changes of concentration over time.

Key-words: Water quality model. Saint-Venant equations. Water resources management. Iguaçu river.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1	– Níveis de classificação de modelos de qualidade de água	19
FIGURA 2	– Representação de esquemas de diferenças finitas explícitas	36
FIGURA 3	– Localização dos pontos de monitoramento no rio Iguaçu	43
FIGURA 4	– <i>Box plots</i> dos dados de concentração observados nos anos de 2005 a 2013	44
FIGURA 5	– Esquema proposto para desenvolvimento das análises	45
FIGURA 6	– Síntese do desenvolvimento dos modelos hidrodinâmico e de qualidade de água	47
FIGURA 7	– Balanço de massa em um volume de controle para um determinado período de tempo	49
FIGURA 8	– Curvas-chave para os pontos de monitoramento	55
FIGURA 9	– Hidrogramas medidos nas estações e utilizados para calibração (2010) e verificação (2011)	56
FIGURA 10	– Vazões medidas e simuladas para 2010 (calibração)	58
FIGURA 11	– Vazões medidas e simuladas para 2011 (verificação)	59
FIGURA 12	– Curvas de permanência com vazões simuladas e observadas para 2010	61
FIGURA 13	– Soluções numérica e analítica para o Caso I	63
FIGURA 14	– Soluções numérica e exata para o Caso II	65
FIGURA 15	– Simulação de concentração de DBO em regime permanente	69
FIGURA 16	– Simulação de concentração de OD em regime permanente	69
FIGURA 17	– Simulação de OD em regime não-permanente com coeficientes de reaeração utilizados no modelo permanente e <i>box plots</i> medidos	71
FIGURA 18	– <i>Box plots</i> medidos (M) e simulados (S) para DBO	72
FIGURA 19	– <i>Box plots</i> medidos (M) e simulados (S) para OD	72
FIGURA 20	– Concentrações médias diárias simuladas (linha contínua) e medições (pontos) de DBO no ano de 2010	73
FIGURA 21	– Concentrações médias diárias simuladas (linha contínua) e medições (pontos) de OD no ano de 2010	74
FIGURA 22	– Simulação de DBO com diferentes coeficientes de desoxigenação para regime permanente e não-permanente	76

FIGURA 23	– Simulação de OD com diferentes coeficientes de reaeração para regime permanente e não-permanente	77
FIGURA 24	– Simulação de OD com diferentes coeficientes de demanda de oxigênio pelo sedimento para regime permanente e não-permanente	78
FIGURA 25	– Curvas de permanência para DBO geradas com dados de monitoramento e a partir da simulação em regime não-permanente e permanente	79
FIGURA 26	– Curvas de permanência para OD geradas com dados de monitoramento e a partir da simulação em regime não-permanente e permanente	80

LISTA DE TABELAS

TABELA 1	– Valores típicos para o coeficiente de rugosidade de Manning	26
TABELA 2	– Coeficientes de dispersão longitudinal em canais naturais	29
TABELA 3	– Valores típicos para os coeficientes K_d e K_s (20°C)	30
TABELA 4	– Taxa de demanda de oxigênio pelo sedimento sugeridas a partir do tipo de leito e localização do canal	33
TABELA 5	– Equações para cálculo da reaeração e respectivas faixas de aplicação	34
TABELA 6	– Identificação dos pontos de monitoramento no rio Iguaçu	42
TABELA 7	– Características hidráulicas da seção trapezoidal	52
TABELA 8	– Inclinação do talude e largura do fundo das seções transversais	53
TABELA 9	– Distância e declividade do canal entre os pontos de monitoramento	53
TABELA 10	– Coeficientes de rugosidade de Manning calibrados	57
TABELA 11	– Coeficientes de Nash-Sutcliffe para as simulações	60
TABELA 12	– Testes para o Caso I com diferentes intervalos de tempo e espaço	63
TABELA 13	– Estimativa das cargas afluentes ao rio Iguaçu para 2010	66
TABELA 14	– Médias de concentração de amônia e nitrito observadas no rio Iguaçu entre 2005 e 2013	67
TABELA 15	– Coeficientes de reação calibrados	68
TABELA 16	– Coeficientes de reaeração utilizados nos modelos de regime permanente e não-permanente	71
TABELA 17	– Coeficientes de variação para dados simulados e medidos	72
TABELA 18	– Valores dos coeficientes de reação usados na análise de sensibilidade	76
TABELA 19	– Diferença absoluta de concentração de DBO e OD entre as curvas de permanência geradas pelos modelos de regime permanente e não-permanente	81
TABELA 20	– Frequências de ocorrência para 10 mgO ₂ /L de DBO e 2 mgO ₂ /L de OD	82

LISTA DE SÍMBOLOS

B	Largura do topo da seção transversal (m)
U	Velocidade longitudinal (m/s)
y	Profundidade do escoamento (m)
q	Contribuição lateral por unidade de comprimento do canal ($\text{m}^3/\text{s m}$)
A	Área da seção transversal (m^2)
x	Distância longitudinal (m)
t	Tempo (s)
v_L	Velocidade de entrada da contribuição lateral (m/s)
Δx	Intervalo de discretização no espaço (m)
Δt	Intervalo de discretização no tempo (s)
g	Aceleração da gravidade ($9,81 \text{ m/s}^2$)
S_o	Declividade do fundo do canal (m/m)
S_f	Declividade da linha de energia (m/m)
n	Coefficiente de rugosidade de Manning ($\text{m}^{-1/3}\text{s}$)
R_H	Raio hidráulico (m)
C	Concentração média na seção transversal (kg/m^3)
F	Termo de reação e cargas ($\text{kg/m}^3\text{s}$)
D	Coefficiente de dispersão longitudinal (m^2/s)
K_d	Coefficiente de taxa de desoxigenação (d^{-1})
K_s	Coefficiente de remoção de DBO pela sedimentação (d^{-1})
K_a	Coefficiente de reaeração (d^{-1})
O_s	Concentração de saturação de oxigênio (mgO_2/L)
K_4	Taxa de demanda de oxigênio pelo sedimento ($\text{gO}_2/\text{m}^2\text{d}$)
N_1	Concentração de amônia (mgN/L)
N_2	Concentração de nitrito (mgN/L)
α_5	Taxa de oxigênio consumido por cada unidade de amônia oxidada (mgO_2/mgN)
α_6	Taxa de oxigênio consumido por cada unidade de nitrito oxidado (mgO_2/mgN)
β_1	Taxa de oxidação da amônia (d^{-1})
β_2	Taxa de oxidação do nitrito (d^{-1})
T	Temperatura (K)
H	Profundidade média do canal (m)
k	Nível de tempo

i	Nível de espaço
f	Variável dependente qualquer
α	Constante do método difusivo de Lax
c	Celeridade (m/s)
λ	Número de difusão
γ	Número de Courant
E_{ns}	Coefficiente de Nash-Sutcliffe
Q	Vazão (m ³ /s)
y_0	Cota para uma descarga nula (m)
a	Constante
r	Constante
R	Coefficiente de correlação de Pearson
b	Largura do fundo da seção transversal (m)
z	Inclinação do talude da seção transversal (m/m)
CV	Coefficiente de variação
P	Perímetro molhado (m)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	EVIDÊNCIAS DE INTERESSE	11
1.2	OBJETIVOS	13
1.3	FUNDAMENTAÇÃO METODOLÓGICA	14
1.4	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	14
2	GESTÃO DE RECURSOS HÍDRICOS E MODELAGEM MATEMÁTICA	16
2.1	ASPECTOS CONCEITUAIS DOS MODELOS DE QUALIDADE DE ÁGUA	18
2.1.1	Principais modelos	21
2.1	EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT	22
2.1.1	Contribuição lateral	24
2.1.2	Força de gravidade e resistência ao escoamento	25
2.2	MODELO UNIDIMENSIONAL DE QUALIDADE DE ÁGUA	27
2.2.1	Demanda bioquímica de oxigênio	29
2.2.2	Oxigênio dissolvido	31
2.3	SOLUÇÕES NUMÉRICAS	34
2.3.1	Aspectos gerais dos esquemas de diferenças finitas explícitas	36
2.3.2	Método difusivo de Lax	37
2.3.3	Método forward-time/centered-space (FTCS)	38
2.4	INTEGRAÇÃO ENTRE MODELAGEM E INSTRUMENTOS DE GESTÃO DE RECURSOS HÍDRICOS	39
2.5	SÍNTESE DO CAPÍTULO	40
3	CARACTERIZAÇÃO GERAL DO RIO IGUAÇU	42
4	SOLUÇÃO DOS MODELOS HIDRODINÂMICO E DE QUALIDADE DA ÁGUA	45
4.1	DISCRETIZAÇÃO DOS MODELOS	47
4.1.1	Equações de Saint-Venant	47
4.1.2	Equação de advecção-dispersão-reação	49
4.2	IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO HIDRODINÂMICO	51
4.2.1	Dados de entrada	52
4.2.2	Resultados	57
4.3	SOLUÇÕES ANALÍTICAS	61

4.4 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA	65
4.4.1 Dados de entrada	65
4.4.2 Calibração	67
4.4.3 Solução em regime permanente	68
4.4.4 Solução em regime não-permanente	70
4.5 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	75
4.6 CURVA DE PERMANÊNCIA	78
5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	83
REFERÊNCIAS	87
ANEXOS	97
A DEDUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT	97
APÊNDICES	102
A SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICA PARA A EQUAÇÃO DE QUALIDADE DE ÁGUA	102
B VALIDAÇÃO DA SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT	104
C CÓDIGOS COMPUTACIONAIS	105
D SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA PARA JANEIRO E JULHO	113
E SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA POR TRECHOS	117
F COEFICIENTE DE DISPERSÃO LONGITUDINAL	119
G SIMULAÇÃO EM REGIME PERMANENTE - TESTE PRELIMINAR	121

1 INTRODUÇÃO

"Problems worthy of attack prove their worth by fighting back."

Piet Hein (1905 - 1996)

A necessidade de compreender e prever o comportamento de corpos aquáticos é de fundamental relevância na engenharia de recursos hídricos. Tal conhecimento permite gerir os usos diversos da água, de modo a assegurar quantidade e qualidade a seus propósitos. Essa necessidade, associada ao advento dos recursos computacionais, serviu para transformar a modelagem matemática em uma ferramenta cada vez mais presente em estudos de engenharia (Cunge *et al.*, 1980).

Modelos de qualidade da água permitem avaliar a dinâmica de diferentes constituintes no corpo hídrico, relacionar causas e efeitos, e prognosticar os resultados de ações de controle e mudanças nas fontes de poluição (Razdar *et al.*, 2011). Diante disso, são parte necessária para a fundamentação técnica da implementação de estratégias de planejamento e gestão de recursos hídricos, particularmente em relação à aplicação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos, previstos na Lei nº 9.433, de 8 de janeiro de 1997.

O lançamento de substâncias em sistemas naturais leva a alterações na dinâmica do mesmo, originando diferentes compostos e interferindo, por exemplo, na disponibilidade de nutrientes, na solubilidade e na toxicidade do ambiente. Essa alteração não fica restrita somente ao trecho do rio onde ocorre o lançamento, mas compromete também as condições a jusante.

A equação que envolve os processos de advecção, dispersão e reação fornece uma estimativa da variação da distribuição de uma determinada substância ao longo do sistema, sendo base para grande parte dos modelos utilizados no gerenciamento hídrico (Souza, 2006). No contexto da implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos, essa análise usualmente tem sido feita em regime permanente, em que a variação temporal não é considerada. Nestes casos, utiliza-se procedimentos aproximados para estimativa do transporte e da área das seções transversais do canal (equação de Manning, por exemplo).

No que concerne ao comportamento hidrológico, em condições críticas, como em períodos de estiagem, a hipótese de regime permanente comumente é válida, pois a variação dos componentes do escoamento em relação ao tempo é muito gradual. Entretanto, em ambientes urbanos, onde o lançamento de cargas poluidoras é dinâmico, a modelagem em

regime estacionário pode levar a resultados imprecisos (Garcia e Tucci, 2000). O modelo hidrodinâmico, formado pelas equações de Saint-Venant, fornece uma estimativa mais próxima do real transporte no canal.

Nesta pesquisa são propostas soluções dos modelos hidrodinâmico e de qualidade da água para propagação de substâncias. A análise é composta por dois módulos: solução das equações de Saint-Venant, que fornece as vazões, e da equação de advecção-dispersão-reação unidimensional, que descreve o transporte e as transformações dos contaminantes ao longo do rio. Essas formulações têm produzido resultados satisfatórios em diversos estudos (Mannina e Viviani, 2010; Torres-Bejarano *et al.*, 2011; Rocha e Pitombeira, 2013).

A poluição provocada pela matéria orgânica pode ser modelada a partir de parâmetros indicativos, como demanda bioquímica de oxigênio (DBO) e oxigênio dissolvido (OD), simulados neste trabalho. Essas são as variáveis de qualidade usualmente analisadas em casos de rios que recebem efluentes industriais e domésticos, e que são reguladas pela legislação em muitos países.

O rio Iguaçu, escolhido para o estudo de caso nesta pesquisa e base de diversas outras publicações, atravessa a área urbana de Curitiba e região metropolitana, recebendo diariamente elevadas cargas poluidoras. A bacia do Alto Iguaçu representa um caso típico de muitas cidades, onde o processo de ocupação irregular de várzeas e áreas de mananciais, além de coleta e tratamento de efluentes insuficientes, comprometam a qualidade da água e geram problemas para os sistemas de abastecimento de água, de tratamento de efluentes e de drenagem urbana (Fernandes, 2013).

Como representa a base territorial para a bacia do Alto Iguaçu e afluentes do Ribeira, os estudos dessa região são referências para a inserção da questão urbana em gestão de recursos hídricos e com pouco detalhamento dentro dos dispositivos legais da Lei nº 9.433/97.

1.1 EVIDÊNCIAS DE INTERESSE

Segundo Meybeck e Helmer (1996), as interpretações de dados de qualidade da água não fornecem conclusões relevantes a menos que sejam baseadas na variabilidade espacial e temporal do regime hidrológico, evidenciando a importância de uma melhor representação física dos sistemas, com uma abordagem matemática mais completa.

Os problemas estudados na bacia do rio Iguaçu, em geral, têm sido baseados no estabelecimento de elementos para suporte a decisão em recursos hídricos considerando uma abordagem em condições de regime permanente (Bäumle, 2005; Kondageski, 2008; França, 2009; Knapik, 2009; Coelho, 2013; Knapik, 2014). Uma importante reflexão a partir desses estudos está na combinação de esforços para obter dados consistentes, e uma análise de transporte mais precisa.

Em estudo comparando simulações com os modelos QUAL2E (regime permanente, desenvolvido por United States Environmental Protection Agency) e Mike 11 (regime não-permanente; Danish Hydraulic Institute) no rio Palmital, inserido na bacia do Alto Iguaçu em Curitiba, Bäumle (2005) chama atenção à necessidade de uma análise crítica em relação à calibração desses modelos, uma vez que critérios distintos podem produzir resultados significativamente diferentes, que interferem na tomada de decisão para ações na bacia. Para Dortch e Johnson (1992), simulações em regime permanente geram resultados satisfatórios porque os efeitos dos processos cinéticos sobre a concentração podem sobrepor os efeitos do transporte, uma vez que a advecção é estimada por métodos simplificados.

Deste modo, somente uma análise mais criteriosa sobre o transporte pode inferir sua real importância sobre a distribuição de massa no sistema. Nesse contexto, uma abordagem em regime não-permanente oferece maior precisão aos resultados pretendidos, e pode auxiliar a análise da incerteza associada aos parâmetros de reação, usualmente utilizados na calibração de modelos de qualidade de água.

Do ponto de vista da gestão de recursos hídricos, a modelagem em regime não-permanente oferece meios para conciliar aspectos quantitativos e qualitativos dos recursos hídricos nas escalas espacial e temporal. Essas informações, condensadas na curva de permanência, podem ser utilizadas para planejamento de ações de monitoramento, controle de lançamentos de cargas, e previsão de cenários na bacia hidrográfica. Contudo, modelos de qualidade de água com essa abordagem são complexos e demandam mais dados para obtenção das soluções, muitas vezes envolvendo as esferas ambiental, econômica e social.

Uma importante questão levantada nesse contexto é se os benefícios do uso dos modelos hidrodinâmico e de qualidade de água justificam o tempo, o custo e as dificuldades adicionais para a gestão de ambientes com forte conflito de ocupação do solo, como é o caso da bacia do Alto Iguaçu.

A modelagem matemática de qualidade da água é uma técnica com aplicações crescentes, principalmente no processo de elaboração de prognósticos da qualidade da água de corpos hídricos. Contudo, em muitos casos os objetivos propostos ao utilizar modelos ficam

limitados, seja pela carência de dados ou por problemas de interpretação dos resultados obtidos (Fleck *et al.*, 2013). Isto posto, fica evidente a necessidade de estudos constantes na área, para que as limitações se transformem em possibilidades de melhoria no processo de execução e interpretação das informações.

1.2 OBJETIVOS

Neste trabalho é desenvolvido um modelo de qualidade de água em regime não-permanente unidimensional para avaliação da distribuição espacial e temporal de poluentes em rios urbanos. Uma solução para o modelo em regime permanente também é produzida. Os resultados obtidos visam servir como embasamento para a aplicação mais eficiente dos instrumentos de gestão de recursos hídricos.

Os objetivos específicos desta pesquisa são:

- obter uma solução numérica das equações de Saint-Venant com o esquema difusivo de Lax;
- resolver o modelo de qualidade de água unidimensional em regime permanente, através do método de diferenças finitas centradas;
- avaliar o método *forward time/centered space* (FTCS) através de comparações de soluções numéricas com soluções analíticas simplificadas;
- obter uma solução da equação de qualidade de água unidimensional em regime não-permanente com o método FTCS;
- calibrar os modelos hidrodinâmico e de qualidade de água com dados de campo obtidos no rio Iguaçu;
- avaliar a distribuição espacial e temporal de poluentes no rio;
- desenvolver curvas de permanência para qualidade e quantidade de água;
- comparar resultados entre simulações em regime permanente e não-permanente, e avaliar as implicações sobre a gestão de recursos hídricos.

1.3 FUNDAMENTAÇÃO METODOLÓGICA

Os planos de monitoramento da qualidade da água no Rio Iguaçu, iniciados em 2005, contemplam em geral de quatro a cinco campanhas de medição por ano. Os estudos desenvolvidos na região, incluindo a modelagem, têm sido baseados nessas informações, considerando que tais dados são representativos das condições do sistema. Esta pesquisa busca levantar questões sobre o impacto dessa aproximação na aplicação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos. Para isso são comparadas as curvas de permanência (que associam concentrações a uma probabilidade de ocorrência) geradas com resultados do modelo de qualidade de água em regime não-permanente e permanente.

A abordagem metodológica para atingir os objetivos propostos consiste em simulações numéricas das equações de Saint-Venant e do modelo de qualidade de água unidimensional, a partir de dois esquemas de diferenças finitas explícitas. O método difusivo de Lax tem sido utilizado com sucesso na solução das equações de Saint-Venant, enquanto o método FTCS usualmente é aplicado em análises envolvendo a equação de advecção-difusão.

Nesta pesquisa foram desenvolvidos métodos computacionais próprios, o que propiciou o ganho de sensibilidade em relação aos diferentes problemas estudados e como estes são relacionados (escoamento em rios e qualidade da água). O programa desenvolvido foi denominado SIHQVAL (Simulação Hidrodinâmica e de Qualidade da Água).

1.4 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

Esta pesquisa está organizada em duas partes principais. A primeira é composta pelo capítulo 2, no qual são revisados os principais conceitos envolvidos em modelagem de qualidade de água, as equações governantes e suas soluções, exemplos de aplicação na literatura e discussões sobre as diferentes abordagens adotadas. A segunda parte inclui a apresentação dos métodos empregados, assim como os resultados obtidos. Nessa etapa inicialmente são resolvidas as equações de Saint-Venant, com uso de dados do rio Iguaçu. Para o módulo de qualidade de água são realizados testes preliminares com soluções analíticas, para avaliar principalmente a aplicabilidade do método numérico sugerido. Em seguida são apresentadas as simulações em estado permanente e não-permanente, e a

comparação de resultados entre ambas através das curvas de permanência. Por fim, no capítulo 5 são discutidas as conclusões do trabalho e sugeridas recomendações para estudos futuros.

2 GESTÃO DE RECURSOS HÍDRICOS E MODELAGEM MATEMÁTICA

“The past thirty years have witnessed major advances in our abilities to model the engineering, economic, ecological, hydrological and sometimes even the institutional or political impacts of large, complex, multipurpose water resources systems. Applications of models to real systems have improved our understanding, and hence have often contributed to improve system design, management and operation. They have also taught us how limited our modelling skills remain.”

LOUCKS, D. P.; BEEK, E. V. Water Resource Systems Modelling: Its Role in Planning and Management. **Water Resources**, UNESCO, 2005.

Com o aumento da degradação hídrica, e em busca de uma gestão mais eficiente, modelos matemáticos têm sido utilizados como ferramenta de apoio para tomadas de decisão em recursos hídricos em todo o mundo (Cox, 2003). Além de descrever as condições de qualidade da água, a modelagem fornece também um modo eficiente de prever as respostas do sistema a intervenções e políticas de gestão, antes mesmo de serem implantadas.

Nesse sentido, alguns trabalhos avaliaram cenários de redução de cargas orgânicas lançadas no sistema estudado, de modo a atender a legislação vigente (Garcia e Tucci, 2000; Bek *et al.*, 2010). Devido à capacidade dos modelos em gerar um entendimento quantitativo, outras pesquisas os têm utilizado para determinar a carga total máxima diária que o sistema hídrico pode receber, para fins de planejamento (Zou *et al.*, 2006; Fonseca *et al.*, 2014).

Outro campo de interesse em que modelos são aplicados envolve a integração com planos de informação, como uso e cobertura do solo, o que fornece subsídios fundamentais para o gerenciamento dos recursos hídricos na bacia hidrográfica (Torres-Bejarano *et al.*, 2011; Lins *et al.*, 2012; Fan *et al.*, 2013). No âmbito de estudos de impacto ambiental, os modelos de qualidade têm sido aplicados na avaliação para alocação de empreendimentos potencialmente poluidores, e definição de níveis de controle para fontes existentes e a serem instaladas em bacias (Cunha *et al.*, 2013; Pereira *et al.*, 2013).

A utilização de modelos de qualidade de água usualmente considera a legislação de cada país. No Brasil, a principal norma relativa a recursos hídricos é a Lei nº 9.433, de 8 de janeiro de 1997, que instituiu a Política Nacional de Recursos Hídricos e criou o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos. Com os objetivos de planejar, regular e

controlar a utilização da água de acordo com padrões e critérios, esse regulamento estabeleceu instrumentos de gestão de recursos hídricos (Brasil, 1997):

- enquadramento dos corpos de água em classes – visa assegurar qualidade da água compatível com seu uso, e diminuir custos de despoluição dos sistemas hídricos;
- outorga dos direitos e cobrança de uso – objetivam assegurar o direito de acesso a qualidade e quantidade de água, preservando os usos múltiplos estabelecidos para o corpo hídrico; a cobrança visa reconhecer a água como bem econômico e incentivar a racionalização de seu uso, além de obter recursos financeiros para programas e intervenções contemplados nos planos de recursos hídricos; esses instrumentos também permitem organizar dados sobre o consumo na bacia;
- planos de recursos hídricos – incluem diagnóstico da situação atual e análise de demandas futuras de água, metas e projetos de racionalização de uso, aumento da quantidade e melhoria da qualidade dos recursos disponíveis, identificação de prioridades para outorga, diretrizes e critérios para a cobrança de uso da água;
- sistema de informações sobre recursos hídricos – visa organizar e divulgar dados e informações atuais sobre a situação qualitativa e quantitativa dos recursos hídricos, de modo a fornecer subsídios para a elaboração dos planos de recursos hídricos.

Esses instrumentos são importantes indutores no processo de conservação e recuperação dos recursos naturais. Assim, é fundamental definir ferramentas que subsidiem seu uso adequado, de modo a integrar as inúmeras variáveis que formam o sistema em estudo. Nesse contexto, a modelagem matemática oferece diversas vantagens. Brites (2010), por exemplo, propõe um modelo para auxílio ao enquadramento de corpos hídricos. O sistema baseia-se na integração entre a probabilidade de ocorrência da qualidade da água e no custo das medidas de despoluição necessárias para aumentar o atendimento ao enquadramento sugerido. Através de simulações hidrodinâmicas e de qualidade da água, Zhou *et al.* (2011) analisaram o tempo de permanência do rio Pearl (localizado na China) em uma determinada classe, e a variação ao longo do ano hidrológico. Deste modo, foi fornecida uma base para controle do lançamento de cargas no sistema.

Os processos de outorga e cobrança para instalação de um novo usuário-poluidor também podem ser inferidos a partir dos resultados obtidos com as simulações de autodepuração do corpo hídrico, tendo em vista a classe de uso no qual foi enquadrado (Rocha, 2007). Nesse sentido, Silva e Ribeiro (2006) estudaram cenários de lançamento de

efluentes na bacia do rio Pirapama (PE), propondo valores a serem cobrados dos poluidores. Nahon (2006), através dos modelos Streeter-Phelps e QUAL2E, desenvolveu um sistema de apoio à análise de outorga de lançamento de efluentes para a variável demanda bioquímica de oxigênio na bacia do Alto Iguaçu. Ainda através do QUAL2E, Marin *et al.* (2007) e Gastaldini e Oppa (2011) avaliaram alternativas de enquadramento para rios que sofrem efeitos das atividades urbanas.

2.1 ASPECTOS CONCEITUAIS DOS MODELOS DE QUALIDADE DE ÁGUA

Os modelos de qualidade de águas superficiais evoluíram amplamente desde os primeiros estudos apresentados por Streeter e Phelps (Streeter e Phelps, 1925). Os procedimentos atuais permitem simular o comportamento de diversas substâncias e processos, de acordo com as condições de escoamento, e inserir o efeito de fontes externas. Esses modelos diferem principalmente em relação às seguintes características (Cox, 2003; Tsakiris e Alexakis, 2012):

- substância simulada (matéria orgânica, nutrientes, metais);
- área de aplicação (águas costeiras ou subterrâneas, rios, reservatórios);
- tipo de dados (discretos ou contínuos);
- análise temporal e espacial (permanente ou não-permanente, concentrado ou distribuído);
- dimensão espacial (unidimensional, bidimensional ou tridimensional);
- processos (mecanicista ou empírico, estocástico ou determinístico).

De acordo com Li e Wang (2009), a modelagem ambiental é formada por duas fases principais: definição do modelo conceitual e do modelo numérico. A primeira etapa consiste em observações, coleta de dados e definição das equações matemáticas que representam o fenômeno de interesse. A determinação das condições iniciais e de contorno também é inserida. Na segunda fase inclui-se o método de solução para o problema proposto, com o programa computacional ou o código que implementa o modelo matemático.

Na determinação do modelo de qualidade a ser aplicado deve-se definir o nível de detalhamento espacial e temporal necessário para as soluções. Essas informações dependem

principalmente das condições do sistema estudado, dos dados e recursos disponíveis, e dos objetivos pretendidos.

A partir do detalhamento estabelecido nos módulos hidráulico e de qualidade, Ambrose *et al.* (1982) *apud* McCutcheon (1989) classificaram os modelos de qualidade da água em quatro níveis, sintetizados na figura 1.

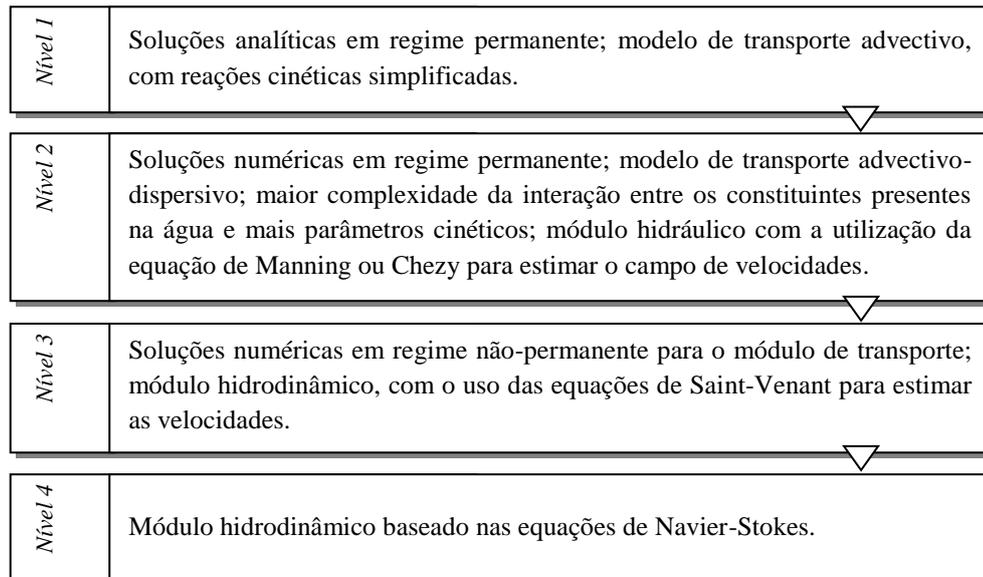


FIGURA 1 – Níveis de classificação de modelos de qualidade de água
 FONTE: adaptado de Ambrose *et al.* (1982) *apud* McCutcheon (1989)

Em geral, soluções analíticas para estudos de qualidade de água são aplicadas a situações idealizadas, como em escoamentos com velocidade uniforme e seção transversal prismática. Muitos trabalhos as utilizam ainda para verificar soluções numéricas (Juxiang *et al.*, 2011; Estabragh *et al.*, 2012). Em situações reais, são dificilmente aplicáveis, uma vez que características como geometria, velocidade e rugosidade variam ao longo do canal.

Devido a variações e irregularidades na seção transversal, presença de curvas, meandros e uma série de outras barreiras, o escoamento em rios tem características tridimensionais. Quando combinadas à expressão de conservação de massa, as equações de Navier-Stokes proporcionam uma descrição matemática completa do campo de velocidades nesses casos. Esta é a modelagem que mais se assemelha à realidade física. Porém, em estudos ligados a recursos hídricos, exige diversas informações, muitas vezes inexistentes. Os modelos tridimensionais são aplicados principalmente em estudos de sistemas largos e profundos, como estuários com padrões de circulação complexos (Cox, 2003).

No escoamento em rios, onde a escala longitudinal é consideravelmente maior que as escalas vertical e transversal, a representação dos processos pode ser realizada de forma mais simples, através de equações unidimensionais (Aldrighetti, 2007; Zhou *et al.*, 2011). Nessa abordagem assume-se que os gradientes longitudinais de concentração prevalecem, e há mistura instantânea nas direções vertical e transversal. Olsen (2007), entretanto, chama atenção ao fato de que a variação da concentração dos poluentes ao longo do rio não é uniforme, devido ao armazenamento em zonas mortas e de recirculação. Segundo o autor, em modelos unidimensionais esse efeito não é avaliado, o que pode diminuir a precisão dos resultados.

Os modelos bidimensionais são indicados em estudos com áreas de inundação, ou para análise de zona de mistura no campo próximo (Dortch e Johnson, 1992). Há, ainda, os modelos chamados zerodimensionais ou concentrados, que assumem mistura completa.

Na determinação do transporte advectivo é importante definir se o escoamento pode ser tratado como permanente (estacionário) ou não-permanente (transitório). O modelo é dito permanente quando se pode considerar que as propriedades do fluxo não variam ao longo do tempo em uma dada posição. Nesta aproximação o campo de velocidades é determinado por métodos simplificados, com o uso da equação de Manning ou Chezy, por exemplo.

Em canais naturais, entretanto, o escoamento ocorre sempre em regime não-permanente, devido a processos como: propagação de ondas de cheia, relacionadas aos processos chuva-vazão na bacia hidrográfica contribuinte ao rio; propagação de ondas geradas pela operação de usinas hidrelétricas ou eclusas de navegação; padrão de drenagem da bacia; lançamento de efluentes. Nesses casos é adequado o uso de modelos hidrodinâmicos, formados pelas equações de Saint-Venant.

De acordo com Garcia e Tucci (2000), as principais condições em que o escoamento não pode ser tratado como permanente são: (i) eventos de cheia com grande quantidade de poluição, que ocorrem em áreas urbanas pela drenagem pluvial; (ii) transporte ou inundação de grande quantidade de nutrientes, gerando alta demanda de oxigênio devido às condições de fluxo (inundação de áreas florestadas e erosão do fundo dos rios, por exemplo); (iii) quando existem oscilações a jusante devido a seiche ou maré.

Tucci e Moretti (1982) mostraram que a simulação em estado estacionário não produz resultados satisfatórios quando o fluxo muda continuamente devido a efeitos de maré. Quando ocorre inversão de fluxo, por exemplo, a concentração de oxigênio dissolvido a montante do rio aumenta. Neste caso, modelos permanentes subestimam a massa presente no sistema estuarino, e projetos para tratamento tornam-se mais onerosos.

Para Von Sperling (2007), os modelos permanentes são mais aplicados em projetos relacionados a planejamento, enquanto os não-permanentes são geralmente usados para ações de controle. Um exemplo é o caso de controle operacional do lançamento de estações de tratamento, onde há um comportamento dinâmico devido à frequente variação das condições externas e internas ao sistema.

Certos fenômenos ainda podem atingir condições permanentes após um pequeno intervalo de tempo e, portanto, podem ser modelados de forma mais simples. Conforme Bowie *et al.* (1985), alguns processos que podem ser representados desse modo incluem decaimento bacteriano e distribuição e reciclagem de nutrientes.

Uma das estratégias mais interessantes é a consideração de escoamentos não-permanentes representados por uma série de escoamentos permanentes, mostrando o desafio que o processo de calibração requer para uma melhor representação da realidade física de um sistema hídrico.

A abordagem não-permanente requer dados de seção transversal e séries temporais, o que, muitas vezes, dificulta sua aplicação. Entretanto, uma vez calibrados, modelos hidrodinâmicos fornecem resultados consistentes para uma diversa gama de condições de escoamento, podendo representar diferentes situações.

2.1.1 Principais modelos

Desde a década de 1960, diversos pacotes comerciais têm sido desenvolvidos para modelagem de qualidade da água. Nesta seção são apresentados alguns dos modelos mais utilizados e suas principais características. Outros trabalhos apresentam revisões estendidas dos principais *softwares* e suas diferenças conceituais, tal como Tsakiris e Alexakis (2012) e Wang *et al.* (2013).

O modelo Streeter-Phelps, desenvolvido em 1925, apresenta uma solução analítica, unidimensional, em regime permanente e uniforme, para reações de primeira ordem para DBO e OD. Mesmo com as simplificações envolvidas, o modelo ainda é aplicado atualmente, principalmente por sua facilidade de uso e por gerar soluções diretas e rápidas (Rocha, 2007; Fan *et al.*, 2012).

O modelo QUAL2E, apresentado pela agência USEPA (United States Environmental Protection Agency) em 1985, permite caracterizar a qualidade da água para vários parâmetros

simultaneamente. As simulações podem ser feitas para o rio principal e para os tributários, com a inclusão de fontes pontuais e difusas. Deste modo, o modelo pode ser empregado na elaboração dos planos de bacia, bem como na implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos (Knapik, 2009). A condição adotada na formulação do modelo, entretanto, é a de regime permanente, com escoamento unidimensional. Portanto, as simulações ficam limitadas a períodos no qual o fluxo e as cargas de entrada permanecem constantes (Brown e Barnwell, 1987).

Dentre os *softwares* de regime não-permanente unidimensionais, destaca-se o MIKE11, desenvolvido pelo Danish Hydraulic Institute. As versões MIKE 21 e MIKE 31 simulam sistemas bidimensionais e tridimensionais, respectivamente. Esses modelos possuem módulos hidrodinâmicos, que geram dados para a solução da equação de transporte advectivo-difusivo. Uma configuração semelhante é feita em outros programas, tal como CE-QUAL-W2 (United States Army Corps of Engineers), HEC-RAS (United States Army Corps of Engineers), Delft e Sobek (Deltares).

Na discussão apresentada por Wang *et al.* (2013), os autores chamam atenção ao fato de frequentemente ocorrerem significativas diferenças de resultados entre esses modelos, devido às distintas hipóteses e métodos de solução adotados. Uma vez que toda modelagem possui simplificações e limitações, para atingir interpretações corretas deve-se atentar ao nível de detalhe requerido pelo problema estudado, e entender quais são as implicações das suposições consideradas.

2.1 EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT

As equações de Saint-Venant são formadas pelas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento unidimensionais. Foram apresentadas em 1871, por Adhémar Barré de Saint-Venant, e são muito utilizadas na modelagem do escoamento em canais (Delphi, 2011; Rahimpour e Tavakoli, 2011; Hwang, 2013).

Tendo em vista o amplo número de variáveis que caracterizam os escoamentos em rios, e a complexidade da geometria de suas calhas, são adotadas algumas hipóteses simplificadoras para a aplicação dos princípios de conservação representados por Saint-Venant (Liggett, 1975):

- a. fluxo unidimensional;

- b. velocidade uniforme em cada seção transversal, variando ao longo da direção longitudinal;
- c. acelerações verticais desprezadas, e distribuição de pressões vertical hidrostática;
- d. declividade do leito do canal suficientemente pequena para que se possa aproximar o seno pela tangente do ângulo de inclinação;
- e. perdas de energia estimadas pelas leis de resistência análogas àquelas usadas para escoamento permanente (equação de Manning ou similar);
- f. leito do canal invariável, ou seja, não se considera erosão ou deposição de sedimentos;
- g. eixo longitudinal do canal aproximado por um trecho retilíneo com pequena declividade;
- h. fluido incompressível.

A partir dessas simplificações, as equações de Saint-Venant podem ser escritas como (Liggett, 1975):

$$B \frac{\partial y}{\partial t} + UB \frac{\partial y}{\partial x} + A \frac{\partial U}{\partial x} + U \frac{\partial A}{\partial x} = q \quad (1)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + g \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{q(v_L - U)}{A} + g(S_0 - S_f) \quad (2)$$

(i) (ii) (iii) (iv) (v)

onde B representa a largura do topo da seção transversal (m) – que varia com a profundidade do escoamento y (m) –, U é a velocidade longitudinal do escoamento (m/s), A é a área da seção transversal (m²), q é a contribuição lateral por unidade de comprimento do canal (m³/s m), g é a aceleração da gravidade (m/s²), v_L é a velocidade de entrada da contribuição lateral na direção longitudinal (m/s), S_0 é a declividade do fundo do canal (m/m) e S_f refere-se à declividade da linha de energia (m/m). Os termos da equação (2) representam: (i) aceleração local; (ii) aceleração convectiva; (iii) força de pressão; (iv) fluxo de momento da contribuição lateral; (v) força de gravidade e de atrito.

As equações (1) e (2), cujas deduções são apresentadas no Anexo A, descrevem o escoamento transitório gradualmente variado em um canal de seção transversal irregular, com contribuição lateral. Na equação de conservação de massa são representados os efeitos de amortecimento dos hidrogramas, devido à variação da capacidade de armazenamento do sistema. A expressão para conservação de quantidade de movimento, por sua vez, considera o

balanço de forças agindo na massa de água, que incluem a gravidade, o atrito, a pressão e a inércia do fluxo. Neste último são retratados os efeitos de translação. O uso do modelo hidrodinâmico permite representar ainda os efeitos de jusante, como remanso e marés (Collischonn e Tassi, 2008; Paiva, 2009).

Apesar de todas as simplificações em que se baseiam, as equações de Saint-Venant são aplicadas em diversos problemas relacionados a canais. No estudo de propagação de vazões, por exemplo, as soluções fornecem velocidade e níveis de água em séries de tempos futuros. Essas expressões também são utilizadas em problemas envolvendo previsão de cheias, ruptura de barragens, escoamentos em estuários e escoamento superficial (Liggett, 1975).

O uso das equações de Saint-Venant oferece maior precisão aos resultados, permitindo uma representação física e temporal do escoamento mais próxima à realidade, além da possibilidade de simular modificações no sistema estudado. A principal dificuldade prática é a necessidade de dados de entrada e para verificação dos resultados, tais como seções transversais e hidrogramas.

2.1.1 Contribuição lateral

A contribuição lateral q representa as vazões que entram ou saem de um canal de forma pontual ou distribuída. Fontes pontuais incluem lançamentos (efluentes domésticos e industriais) e tributários, ou ainda captações, que diminuem a vazão de escoamento. Exemplos de fontes difusas são precipitação e evaporação na superfície de água, infiltração no solo e escoamento superficial.

Para Von Sperling (2007), é importante incluir a contribuição lateral difusa nos casos em que o início do trecho simulado está associado a uma bacia de contribuição pequena, mas que aumenta consideravelmente ao longo do percurso. Nestas situações o hidrograma de montante pode diferir substancialmente do de jusante.

Hassan *et al.* (2008) aponta que a contribuição lateral tem efeitos significativos nos valores simulados, principalmente na análise do tempo do pico de cheia. O aporte lateral de água, por escoamento superficial e maior vazão dos afluentes, contribui para o aumento do valor desse máximo de vazão. A infiltração também tem um importante papel nesse caso, uma vez que, após passarem as primeiras ondas de cheia e o solo ficar saturado, a largura do rio tende a aumentar, fazendo com que os níveis de água fiquem maiores.

Em geral, a contribuição lateral q tem sido calculada com dados medidos (Steinstrasser, 2005; Zhou *et al.*, 2011). Pode-se estimá-la, por exemplo, pela relação entre a diferença de vazão para dois pontos significativos (como afluentes), e a distância entre os mesmos. Outros trabalhos ainda obtêm valores de q com base em modelos hidrológicos, considerando os processos de precipitação, evaporação, infiltração etc (Paiva, 2009; Sousa, 2010).

2.1.2 Força de gravidade e resistência ao escoamento

Em canais com superfície livre, a componente do “peso da água” na direção longitudinal causa aceleração do fluxo, e desaceleração caso a declividade do leito seja negativa. Na avaliação da força de gravidade, em geral a inclinação é pequena o suficiente para que a declividade S_0 seja aproximada por $\sin(\theta)$. Uma declividade pode ser dita pequena se for menor que 0,05 m/m (Chaudhry, 2008). Segundo Liggett (1975), para um S_0 de 0,29 m/m, que representa um canal com alta inclinação, o erro resultante dessa simplificação é de apenas 2%.

De acordo com Jacon e Cudo (1989), a declividade ao longo da direção longitudinal é bastante variável em canais naturais, porém mantém-se praticamente constante ao longo do tempo. Ainda conforme os autores, isso vale mesmo em leitos com fundo móvel, uma vez que essa inclinação é uma característica dependente principalmente da topografia da região.

A resistência ao escoamento é causada pelo cisalhamento da água com as margens e o fundo do canal. Apesar de terem sido desenvolvidas para escoamento uniforme e permanente, aceita-se que as equações de Manning ou Chézy são suficientemente adequadas para o cálculo da resistência em canais abertos com regime não-permanente (Chow, 1959; Liggett, 1975). Logo, a equação de Manning pode ser utilizada para estimar a declividade da linha de energia (Stepien, 1984):

$$S_f = \left(\frac{nU}{R_H^{2/3}} \right)^2 \quad (3)$$

onde n representa o coeficiente de rugosidade de Manning ($m^{-1/3}s$) e R_H é raio hidráulico (m).

O coeficiente de rugosidade de Manning representa a resistência devido ao atrito no canal, e compõe a maior dificuldade para a aplicação da equação (3). Diversos fatores interferem em sua determinação, tais como: evento de escoamento (estiagem ou cheia), presença de vegetação e obstruções (pontes e comportas, por exemplo), tipo de material que constitui o leito, irregularidade das seções transversais, e alinhamento do rio (presença de meandros ou trechos retificados) (Chow, 1959; Arcement e Schneider, 1984). Na tabela 1 são exibidos valores típicos para o coeficiente de rugosidade em canais naturais, de acordo com o material do leito.

TABELA 1 – Valores típicos para o coeficiente de rugosidade de Manning

MATERIAL DO LEITO	COEFICIENTE n ($m^{-1/3}s$)
Terra escavada limpa	0,023
Terra (canal em boas condições e uniforme, com pedras e cascalhos)	0,025
Terra (canal retilíneo, com pouca vegetação)	0,026
Terra (meandros, sem vegetação); leito natural limpo	0,030
Cascalho	0,040
Terra (canal com meandros e vegetação)	0,050

Fonte: adaptado de Jeppson (2011)

A determinação do coeficiente n pode ser realizada diretamente, através de medições do campo de velocidade, de características hidráulicas e de cotas em seções distintas. Expressões empíricas, que consideram a granulometria do canal, também podem ser utilizadas para aferir esse valor. Entretanto, mesmo através de procedimentos documentados, verificação de campo e métodos de calibração, existem incertezas na determinação da rugosidade (Chow, 1959; Arcement e Schneider, 1984). Deste modo, em situações práticas seu valor geralmente é estimado de acordo com tabelas apresentadas na literatura ou através de analogia com outros canais.

2.2 MODELO UNIDIMENSIONAL DE QUALIDADE DE ÁGUA

Os modelos de qualidade de água são originados do princípio da conservação de massa, que pode ser expresso como o balanço entre as transferências de matéria através dos contornos e as transformações que ocorrem dentro de um sistema. Para um determinado período de tempo, esse balanço pode ser representado como (Chapra, 1997):

$$\text{Acumulação} = \text{cargas} \pm \text{transporte} \pm \text{transformações} \quad (4)$$

O transporte da massa ocorre devido aos processos de advecção, difusão e dispersão. O fenômeno de advecção é responsável pelo transporte de material particulado ou dissolvido através do próprio movimento do fluido.

A difusão constitui o processo no qual a massa é propagada devido ao movimento aleatório das partículas, podendo ser difusão molecular ou turbulenta. Segundo Nogueira (1991), a difusão molecular ocorre através do movimento errático das moléculas, e constitui uma propriedade do fluido. A difusão turbulenta, por outro lado, é função das condições em que ocorre o escoamento. Ela resulta do movimento aleatório de pequenos turbilhões, e é significativamente maior que a difusão molecular.

Por fim, a dispersão representa o processo no qual os poluentes são misturados na água pela interação entre difusão turbulenta e gradientes de velocidade. Em canais abertos, onde há turbulência devido a gradientes de velocidade, mudanças de seção transversal e de rugosidade, a dispersão predomina sobre a difusão (Schnoor *et al.*, 1987; Chapra, 1997).

Em estudos de qualidade da água, negligenciar a difusão ou a dispersão pode levar a resultados imprecisos. Os autores Martin e McCutcheon (1999) afirmam que desconsiderar esses efeitos de mistura causa superestimação dos picos de concentração, e subestimação do tempo de chegada e da duração dos efeitos de lançamentos.

O termo de transformações na equação (4) inclui as variações de distribuição de massa da substância estudada que ocorrem independentemente do processo de transporte. Representa as perdas ou ganhos devido a processos químicos (reações químicas em geral), físicos (decantação de particulados, por exemplo) ou biológicos (como crescimento e morte de algas) dentro do sistema. Em geral, tais processos são descritos por reações cinéticas de primeira ordem e valores baseados na literatura (Thomann e Mueller, 1987; Chapra, 1997).

A distribuição de massa de uma determinada espécie no corpo hídrico também é alterada por meio de contribuições pontuais ou contínuas, especificadas no termo de cargas. Estas incluem principalmente despejos de efluentes domésticos e industriais, tributários e escoamento superficial.

A distribuição de um constituinte na água é representada pela grandeza física concentração. Considerando os processos descritos na expressão (4) e utilizando os princípios de conservação de massa, a concentração de uma determinada substância em um rio com escoamento predominante na direção longitudinal pode ser expressa matematicamente por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{D}{A} \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x} - D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \pm F = 0 \quad (5)$$

onde C é a concentração média na seção transversal de um determinado constituinte (kg/m^3), D representa o coeficiente de dispersão longitudinal (m^2/s), e F é o termo para transformações de massa e cargas externas ($\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$).

A determinação adequada dos parâmetros de dispersão longitudinal e de reação (inseridos no termo F) são fundamentais para a exatidão das soluções numéricas da equação (5). O coeficiente D pode ser medido diretamente ou estimado por expressões empíricas, como apresentado por Fisher *et al.* (1979). Medições em campo, por sua vez, envolvem experimentos com traçadores, conforme realizado por Atkinson e Davis (2000). De acordo com Gunduz (2004), esse é o método ideal para obter esse valor, porém é aplicável somente a trechos onde o estudo é conduzido.

Na tabela 2 são apresentados coeficientes de dispersão medidos em rios nos Estados Unidos, com variadas características hidráulicas (profundidade, largura e velocidade médias). Uma vez que depende das propriedades do fluido, das características hidráulicas e da geometria do canal, verifica-se que o valor de D pode variar significativamente de um sistema para outro. Alguns trabalhos ainda optam pelo uso de um coeficiente constante nas simulações, muitas vezes usado como parâmetro de calibração do modelo (Hsu *et al.*, 1999; Liu *et al.*, 2014).

TABELA 2 – Coeficientes de dispersão longitudinal em canais naturais

RIO	y (m)	B (m)	U (m/s)	D (m ² /s)
Power	0,85	33,8	0,16	9,5
Clinch	0,58	36	0,30	8,08
Bayou Anacoco	0,94	25,9	0,34	32,52
	0,41	19,8	0,29	13,94
Nooksack	0,76	64	0,67	34,84
	2,94	86	1,20	153,29
Antietam creek	0,39	15,8	0,32	9,29
	0,52	19,8	0,43	16,26
	0,71	24,4	0,52	25,55
Monocacy	0,32	35,1	0,21	4,65
	0,45	36,6	0,32	13,94
	0,87	47,5	0,44	37,16
Missouri	2,23	182,9	0,93	464,52
	3,56	201,2	1,27	836,13
	3,11	196,6	1,53	891,87

FONTE: adaptado de Kashefipour e Falconer (2002)

2.2.1 Demanda bioquímica de oxigênio

A matéria orgânica é introduzida nos corpos hídricos principalmente por meio do lançamento de esgoto doméstico, podendo estar presente em alguns efluentes industriais ou até mesmo naturalmente, como parte dos ciclos biogeoquímicos. Esse material é formado por compostos de proteína, carboidratos, gordura, óleos, ureia, surfactantes, fenóis, pesticidas e outros componentes em menor quantidade. Entretanto, em estudos de qualidade de água usualmente é analisada somente a matéria carbonácea, pois essa é a parcela que consome oxigênio.

A demanda bioquímica de oxigênio (DBO) é o parâmetro comumente utilizado para quantificação da matéria orgânica em ambientes hídricos. No entanto, constitui uma medida indireta, uma vez que indica somente o potencial de consumo do oxigênio dissolvido na decomposição da parcela biodegradável da matéria orgânica.

Para o parâmetro DBO, o termo F da equação (5) é representado por (Brown e Barnwell, 1987):

$$F_{DBO} = -(K_d + K_s)C_{DBO} + CARGAS \quad (6)$$

onde C_{DBO} é a concentração de DBO (mgO_2/L), K_d representa o coeficiente de taxa de desoxigenação (d^{-1}) e K_s é o coeficiente de remoção de DBO pela sedimentação (d^{-1}).

O coeficiente K_d incorpora a decomposição da matéria orgânica pela biomassa suspensa na massa líquida e pela biomassa do lodo de fundo. A transformação da matéria pelas bactérias aderidas ao lodo de fundo depende da área de exposição e, portanto, em sistemas rasos (com profundidade entre 1,0 e 1,5 metros, segundo Von Sperling, 2007), o valor de K_d tende a ser maior do que em rios profundos. Esse coeficiente pode ser determinado através de métodos matemáticos e estatísticos, caso se disponha de amostras de água a serem analisadas. É influenciado principalmente pela temperatura, pelas características da matéria orgânica, e pela presença de substâncias inibidoras no sistema.

Na tabela 3 são apresentadas faixas de variação características para os coeficientes K_d e K_s . Este último está relacionado à remoção da matéria orgânica da coluna d'água por sedimentação. De acordo com Chapra (1997), os efeitos da sedimentação podem ser significativos para lançamentos de esgoto *in natura* em corpos hídricos rasos, como observado na tabela 3. Nessas regiões há uma maior facilidade (ou rapidez) para a sedimentação ocorrer.

TABELA 3 – Valores típicos para os coeficientes K_d e K_s (20°C)

ORIGEM	RIOS RASOS		RIOS PROFUNDOS	
	K_d (d^{-1})	K_s (d^{-1})	K_d (d^{-1})	K_s (d^{-1})
Curso d'água recebendo esgoto bruto concentrado	0,50 – 1,00	0,10 – 0,35	0,35 – 0,50	0,05 – 0,20
Curso d'água recebendo esgoto bruto de baixa concentração	0,40 – 0,80	0,05 – 0,25	0,30 – 0,45	0,00 – 0,15
Curso d'água recebendo efluente primário	0,40 – 0,80	0,05 – 0,10	0,30 – 0,45	0,00 – 0,05
Curso d'água recebendo efluente secundário	0,12 – 0,24	-	0,12 – 0,24	-
Curso d'água com águas limpas	0,08 – 0,20	-	0,08 – 0,20	-

FONTE: Von Sperling (2007)

Segundo Velz (1949) *apud* Von Sperling (2007), condições de vazões mínimas, com velocidades de fluxo maiores do que 0,20 m/s, podem promover revolvimento do lodo, e, portanto, gerar ressuspensão do material sedimentado. O valor de K_s pode também ser

estimado pela relação entre a velocidade de sedimentação da partícula e a profundidade média da coluna d'água.

2.2.2 Oxigênio dissolvido

Em condições naturais, as águas constituem ambientes com baixa concentração de oxigênio, devido a sua reduzida solubilidade. O teor de oxigênio dissolvido (OD) intervém em diversas reações químicas e biológicas, sendo indispensável para a dinâmica do ecossistema e para a manutenção da vida aquática (Cunha e Ferreira, 2006). A presença de certos poluentes, principalmente de origem orgânica, contribui para a diminuição da concentração de OD, podendo comprometer a qualidade da água.

No corpo hídrico, as fontes de oxigênio dissolvido incluem reaeração da atmosfera, produção de oxigênio por fotossíntese e contribuição de tributários ou efluentes. O consumo de OD, por sua vez, ocorre devido à oxidação da matéria carbonácea e da matéria nitrogenada, à demanda de oxigênio pelo sedimento, e ao uso de oxigênio para respiração de algas (Thomann e Mueller, 1987).

Nesta pesquisa os coeficientes relativos à modelagem de alga (clorofila-a) não foram analisados, uma vez que, segundo Knapik (2009), os resultados do monitoramento de campo indicaram baixas concentrações de clorofila-a no rio Iguaçu.

Deste modo, considerando as fontes e sumidouros, o balanço de oxigênio dissolvido em rios pode ser escrito como (Brown e Barnwell, 1987):

$$F_{OD} = K_a (O_s - C_{OD}) - K_d C_{DBO} - K_4 / H - \alpha_5 \beta_1 N_1 - \alpha_6 \beta_2 N_2 \quad (7)$$

onde K_a é o coeficiente de reaeração (d^{-1}), O_s representa a concentração de saturação de oxigênio dissolvido (mgO_2/L), C_{OD} é a concentração de OD (mgO_2/L), K_4 é a taxa de demanda de oxigênio pelo sedimento (gO_2/m^2d), H define a profundidade média do canal (m), α_5 representa a taxa de oxigênio consumido por cada unidade de amônia oxidada (mgO_2/mgN), α_6 é a taxa de oxigênio consumido por cada unidade de nitrito oxidado (mgO_2/mgN), β_1 é a taxa de oxidação da amônia (d^{-1}), β_2 é a taxa de oxidação do nitrito (d^{-1}), N_1 é a concentração de amônia (mgN/L) e N_2 define a concentração de nitrito (mgN/L).

A concentração de saturação de oxigênio dissolvido ocorre quando, para uma dada temperatura, há equilíbrio da troca na interface ar-água (Thomann e Mueller, 1987). Uma expressão para O_s a nível do mar como função da temperatura é dada por (Brown e Barnwell, 1987):

$$\ln O_s = -139,34410 + (1,575701 \times 10^5 / T) - (6,642308 \times 10^7 / T^2) + (1,243800 \times 10^{10} / T^3) - (8,621949 \times 10^{11} / T^4) \quad (8)$$

onde T é a temperatura absoluta da água (K). O valor de O_s é também influenciado pela salinidade e pela pressão atmosférica, porém tais efeitos não são considerados nessa pesquisa.

No meio líquido, o nitrogênio apresenta-se nas formas de nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal (amônia), nitrito e nitrato. Dentre os processos de conversão da matéria nitrogenada, a amonificação (conversão do nitrogênio orgânico a amônia) e a nitrificação (oxidação da amônia a nitrito, e deste a nitrato) consomem oxigênio. Brown e Barnwell (1987) sugerem os seguintes intervalos de variação para os coeficientes associados ao nitrogênio: α_5 (3,0 – 4,0) mgO₂/mgN, α_6 (1,0 – 1,14) mgO₂/mgN, β_1 (0,1 – 1,0) d⁻¹ e β_2 (0,2 – 2,0) d⁻¹.

O material em suspensão presente na água pode sedimentar em determinados trechos, formando uma camada de lodo no fundo do curso d'água. Além da matéria originada de efluentes, folhas e plantas aquáticas, esses depósitos são constituídos por uma biota específica, que contribuem para o consumo de OD no corpo hídrico. A taxa de deposição pode variar de acordo com a vazão; em períodos de estiagem, a deposição de sólidos é favorecida, enquanto em cheias o material pode ser removido ou transportado para outro trecho do sistema.

Além da vazão, a demanda de oxigênio pelo sedimento ainda é afetada por: temperatura, concentração de oxigênio na interface sedimento-água (oxigênio disponível), disposição da comunidade biológica, profundidade da camada de sedimento e características orgânicas e físicas do sedimento. A tabela 4 exhibe faixas de valores para o coeficiente K_d sugeridas de acordo com o tipo de leito do canal.

TABELA 4 –Taxa de demanda de oxigênio pelo sedimento sugeridas a partir do tipo de leito e localização do canal

TIPO DE LEITO E LOCALIZAÇÃO	K_d (gO ₂ /m ² d, 20°C)	
	VARIAÇÃO	MÉDIA APROXIMADA
Lodo de esgoto - nas proximidades do ponto de lançamento)	2,0 – 10	4,0
Lodo de esgoto - a jusante do ponto de lançamento	1,0 – 2,0	1,5
Leito estuarino	1,0 – 2,0	1,5
Leito arenoso	0,2 – 1,0	0,5
Leito de solo mineral	0,05 – 0,1	0,07

FONTE: Thomann e Mueller (1987)

O processo de reaeração consiste na troca de oxigênio na interface ar-água, e sofre interferência principalmente das características hidráulicas do canal, da presença de surfactantes e partículas suspensas, da ação do vento e da temperatura da água (Bowie *et al.*, 1985). O coeficiente K_a pode ser determinado por análises estatísticas ou por técnicas mais complexas, com o uso de traçadores gasosos e avaliações do balanço de massa no sistema. Em modelos de qualidade de água, entretanto, usualmente são utilizadas fórmulas (conceituais e empíricas), valores médios tabelados ou valores relacionados com a vazão do corpo hídrico.

As expressões mais comuns para determinar K_a se baseiam nos aspectos hidráulicos do canal estudado, como profundidade, velocidade, declividade e vazão. Elas se diferenciam pelas faixas de aplicação sugeridas, e seus resultados podem divergir significativamente (Ávila, 2014). Na tabela 5 são apresentadas três das principais equações usadas para determinar o coeficiente K_a .

Os resultados das simulações de OD usualmente se mostram bastante sensíveis aos valores do parâmetro K_a . Os intervalos de variação desse coeficiente são mais amplos, refletindo uma maior incerteza associada a essa taxa (Von Sperling, 2007; Mannina e Viviani, 2010).

Palmieri (2003) chama atenção à unicidade da combinação dos parâmetros ajustados. Segundo o autor, existem diversas combinações entre esses coeficientes, especialmente entre a taxa de desoxigenação (K_d) e o coeficiente de reaeração (K_a) que levam ao mesmo resultado simulado.

TABELA 5 – Equações para cálculo da reaeração e respectivas faixas de aplicação

AUTORES	K_a (d^{-1} , 20°C)	FAIXA DE APLICAÇÃO
O'Connor e Dobbins (1958)	$\frac{3,95U^{0,5}}{H^{1,53}}$	$0,27 \leq H \leq 7,38$ m $0,10 \leq U \leq 1,28$ m/s
Churchill <i>et al.</i> (1962)	$\frac{5,03U^{0,969}}{H^{1,673}}$	$0,65 \leq H \leq 3,48$ m $0,56 \leq U \leq 1,52$ m/s
Owens <i>et al.</i> (1964)	$\frac{5,34U^{0,67}}{H^{1,85}}$	$0,12 \leq H \leq 3,35$ m $0,03 \leq U \leq 1,52$ m/s

FONTE: adaptado de Brown e Barnwell (1987)

2.3 SOLUÇÕES NUMÉRICAS

Um dos métodos mais aplicados para solução das equações de Saint-Venant é o método das características (Delphi, 2011; Mendoza *et al.*, 2011; Lobeiro, 2012), cujo procedimento oferece a possibilidade de descrever a propagação de ondas e definir com maior precisão as condições de contorno (Hashemi *et al.*, 2007; Chaudhry, 2008). Para problemas com geometria complexa, em duas ou três dimensões, o método dos elementos finitos também tem sido aplicado com êxito no modelo hidrodinâmico (Anjos *et al.*, 2006; Zarmehi *et al.*, 2011) e no modelo de qualidade de água (Dhawan *et al.*, 2012; Estabragh *et al.*, 2012). Esses métodos têm uma base matemática relativamente complexa, e possuem os mesmos problemas comuns a outros esquemas numéricos, tais como erros de aproximações e estabilidade condicionada.

O método dos volumes finitos é uma alternativa para solução de problemas complexos, pois oferece uma discretização mais simples em domínios bi e tridimensionais (Szymkiewicz, 2010). Nos últimos anos o esquema tem sido aplicado em estudos envolvendo rompimentos de barragem (Peng, 2012; Fabiani e Ota, 2013), e também na solução da equação de advecção-dispersão (Zou *et al.*, 2006; Slingerland, 2007).

Os métodos de diferenças finitas, explícitos ou implícitos, são os procedimentos mais utilizados em problemas unidimensionais. Esses esquemas baseiam-se no princípio de transformação das equações diferenciais em expressões algébricas, em que as derivadas são convertidas em diferenças finitas (Chaudhry, 1979; Gunduz, 2004). Em geral, têm primeira ou segunda ordem de acurácia, são simples para implementação computacional e geram resultados rapidamente (Li e Jackson, 2007).

Esquemas explícitos usuais são: Forward-Time/Centered-Space (FTCS), MacCormack, QUICK, Leap-Frog e Lax. Entre os implícitos, destacam-se: Backward-Time/Centered-Space (BTCS), Crank-Nicolson e Preissman. O método explícito é mais simples e de fácil implementação, porém a estabilidade é condicionada ao intervalo de tempo de simulação. No método implícito a obtenção das soluções envolve a resolução de um sistema de equações, porém a escolha da discretização temporal é menos restritiva que a do esquema explícito.

Apesar de não apresentarem condicionantes em relação à análise de estabilidade, alguns trabalhos têm reportado que determinados métodos implícitos exibem problemas de precisão e acurácia dos resultados ao aumentar o número de Courant (Gajdos e Mandelkern, 1998; Hashemi *et al.*, 2007). Em comparações de soluções da equação de Saint-Venant com os esquemas difusivo de Lax (explícito) e de Beam-Warming (implícito), Kalita e Sarma (2012) mostraram que o tempo de processamento deste último foi significativamente maior. Segundo os autores, isso ocorreu devido a solução de matrizes extensas no método implícito. Na solução da equação de advecção-dispersão-reação, Li e Jackson (2007) também mostraram que o método de MacCormack (explícito) produziu resultados de maneira mais rápida que esquemas implícitos.

Um problema para as soluções numéricas se refere às escalas de processos hidrodinâmicos (escoamento) e de qualidade de água (transporte), que nem sempre são consistentes. Segundo Wang (2001), isso pode gerar problemas conceituais significativos quando os diferentes modelos são acoplados. Para Atkinson *et al.* (1998), soluções de qualidade da água podem ser obtidas nas mesmas escalas usadas no modelo hidrodinâmico, porém deve-se considerar que dados em malhas refinadas de tempo e espaço usualmente não estão disponíveis, o que interfere na verificação dos resultados. Deste modo, existe o desafio de compatibilizar as escalas dos módulos hidrodinâmico e de qualidade, de modo a representar adequadamente os processos envolvidos e ainda manter as condições de estabilidade.

Alguns critérios devem auxiliar a seleção do método de diferenças finitas a ser aplicado: consistência, estabilidade e convergência. A consistência refere-se à relação entre a equação diferencial parcial contínua e sua aproximação discreta. Um esquema é dito consistente se, ao aproximar de zero o espaçamento da malha, a diferença entre essas duas representações tender à nulidade. A estabilidade, por sua vez, é uma propriedade relacionada com a discretização temporal. Em esquemas instáveis, uma pequena perturbação, tal como um erro de truncamento, tende a crescer à medida que o processo de cálculo avança no tempo. Por fim, a convergência relaciona a diferença entre resultados obtidos com a solução exata e

com a solução calculada pelo método. O esquema é convergente quando essa diferença tende a zero com a diminuição do espaçamento da malha. Consistência e estabilidade são requisitos essenciais para que o esquema de discretização seja convergente (Kaviski, 2013).

A escolha do método depende principalmente das particularidades do problema a ser resolvido. Em qualquer solução numérica erros são introduzidos, seja pelas aproximações dos métodos ou pela escolha de parâmetros de simulação. Bons resultados dependem sobretudo da definição correta das condições de contorno (Liggett e Cunge, 1975; Steinstrasser, 2005).

2.3.1 Aspectos gerais dos esquemas de diferenças finitas explícitas

O método de diferenças finitas transforma o espaço e o tempo contínuos em um problema discreto. Em geral, a discretização é feita com o auxílio de uma malha de espaçamento constante, e os valores procurados são avaliados em cada nó da grade.

A grade de discretização do esquema explícito é representada na figura 2, em que o índice k refere-se ao nível de tempo e i ao espaço.

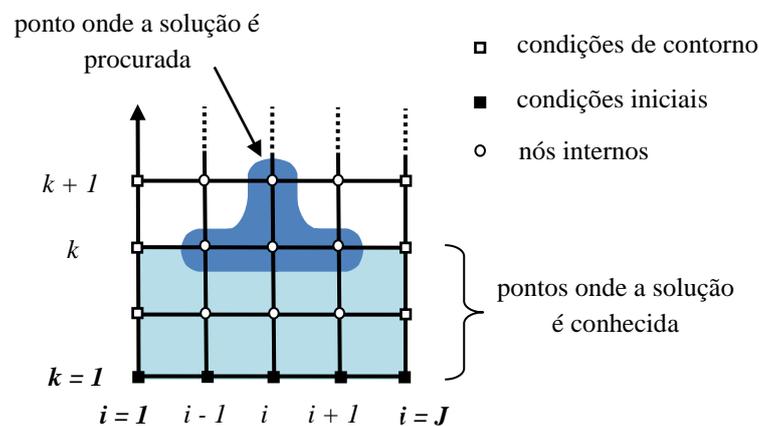


FIGURA 2 – Representação de esquemas de diferenças finitas explícitas

No esquema explícito somente a derivada temporal envolve variáveis desconhecidas. A solução avança ponto a ponto ao longo de uma linha de tempo no domínio $x-t$, até todas as variáveis desconhecidas associadas a essa linha de tempo terem sido obtidas. Em seguida a solução prossegue para o próximo passo de tempo.

2.3.2 Método difusivo de Lax

O esquema difusivo de Lax foi apresentado pelo matemático Peter Lax em 1954. Constitui um método de diferenças finitas explícito e de simples aplicação, com acurácia de primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço (Tannehill *et al.*, 1997).

Na avaliação da derivada temporal é utilizada uma média ponderada da solução em pontos adjacentes da grade no $k^{\text{ésimo}}$ passo de tempo. As derivadas parciais temporais e espaciais são aproximadas pelas seguintes representações (Liggett e Cunge, 1975):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_i^{k+1} - [\alpha f_i^k + (1-\alpha) f^*]}{\Delta t} \quad (9)$$

$$f^* = \frac{f_{i-1}^k + f_{i+1}^k}{2} \quad (10)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_{i+1}^k - f_{i-1}^k}{2\Delta x} \quad (11)$$

onde f representa a variável dependente, e α é uma constante; Δx e Δt definem o intervalo de discretização espacial e temporal, respectivamente.

Para $\alpha = 0$ o esquema é chamado de difusivo puro e, se $\alpha = 1$, o esquema torna-se instável. A utilização de um α pequeno (0,1, por exemplo) pode suavizar resultados com oscilações (Liggett e Cunge, 1975).

A estabilidade do método depende da condição de Courant, dada por (Liggett e Cunge, 1975):

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{|U + c|} \quad (12)$$

A variável c na equação (12) representa a celeridade (m/s), expressa como:

$$c = \sqrt{gA/B} \quad (13)$$

onde g é a aceleração da gravidade (m/s^2), A é a área da seção transversal (m^2) e B representa a largura do topo da seção transversal (m).

Segundo Steinstrasser (2005), o método é estável e convergente para a solução das equações de Saint-Venant, como comprovado também por Akbari e Firoozi (2010), Kalita e Sarma (2012), e Patowary e Sarma (2013).

2.3.3 Método forward-time/centered-space (FTCS)

No método FTCS, a derivada temporal é aproximada por diferença progressiva, e as derivadas espaciais são estimadas por diferenças centradas:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_i^{k+1} - f_i^k}{\Delta t} \quad (14)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_{i+1}^k - f_{i-1}^k}{2\Delta x} \quad (15)$$

A derivada de segunda ordem é aproximada por:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f_{i+1}^k - 2f_i^k + f_{i-1}^k}{(\Delta x)^2} \quad (16)$$

Os requerimentos para estabilidade do método para a equação de advecção-dispersão são dados por (Chapra, 1997):

$$\lambda = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2} \quad (17)$$

$$\gamma = \frac{U\Delta t}{\Delta x} < 1 \quad (18)$$

onde λ é o número de difusão e γ é o número de Courant.

O método FTCS é consistente e convergente, porém os requerimentos de estabilidade podem representar uma dificuldade, uma vez que o passo de tempo varia com o quadrado do intervalo espacial. Para Δt grandes, as soluções tornam-se instáveis. O esquema tem acurácia

de primeira ordem para o tempo e segunda ordem para o espaço (Chapra, 1997; Tannehill *et al.*, 1997).

Principalmente na comparação de soluções numéricas e analíticas da equação de advecção-dispersão-reação, o método FTCS tem-se mostrado eficiente (Ataie-Ashtiani *et al.*, 1996; Li e Jackson, 2007; Najafi, 2008).

2.4 INTEGRAÇÃO ENTRE MODELAGEM E INSTRUMENTOS DE GESTÃO DE RECURSOS HÍDRICOS

Uma importante característica do uso do modelo de qualidade de água em regime não-permanente como ferramenta da gestão de recursos hídricos é a possibilidade de integração entre os aspectos de quantidade e qualidade de água. Essa integração pode ser compilada através do conceito da curva de permanência, que permite a associação entre concentrações e vazões. Deste modo, pode-se relacionar a concentração a uma determinada probabilidade de ocorrência, indicando o percentual de tempo em que esta concentração é igualada ou superada pelo menos uma vez ao longo do período simulado ou observado.

Essa abordagem inovadora foi utilizada por Porto *et al.* (2007) e Brites (2010), que associaram concentrações a vazões observadas no rio Iguaçu através de dados de monitoramento e simulação de qualidade da água em condição permanente. Os resultados potencializaram a utilização da noção de risco em relação ao atendimento de valores de concentração, usados para a elaboração de estratégias de enquadramento e outorga, por exemplo.

Outras pesquisas recentes também têm explorado essas curvas com dados de qualidade da água em rios (Cunha *et al.*, 2011a; Oliveira *et al.*, 2011; Cunha *et al.*, 2012) e reservatórios (Cunha *et al.*, 2011b). Alguns estudos ainda avaliaram o risco porcentual de incompatibilidade dos resultados de monitoramento com padrões de qualidade (Zhang e Arhonditsis, 2008; Cunha e Calijuri, 2010).

Com o estabelecimento das porcentagens de atendimento às classes ao longo do tempo, pode-se garantir flexibilidade ao enquadramento, ou verificar a frequência de transgressão dos limites. A partir da relação quantidade-qualidade é possível inferir ainda quais os períodos e locais críticos, definindo um planejamento adequado para retiradas de

água e lançamento de efluentes ao longo do ano. Do mesmo modo, em trechos ou ocasiões de maior demanda, pode-se regular a cobrança pelo uso da água.

No monitoramento ambiental, os resultados da modelagem permitem extrapolar as informações existentes, ou até mesmo auxiliar a definição de planos de amostragem. A simulação hidrodinâmica – e, portanto, as curvas de permanência originadas – incorpora variações meteorológicas, alterações de uso e ocupação do solo, além do lançamento de cargas. Com isso, é possível desenvolver metas de despoluição, organizar medidas de controle, e definir cargas máximas de lançamento, por exemplo. Isso serve como auxílio também na elaboração dos sistemas de informações sobre recursos hídricos, e na preparação de planos de recursos hídricos, amparando as agências reguladoras e os gestores na tomada de decisões, de forma técnica e criteriosa. Essas informações são então aplicadas visando economia de recursos e atendimento aos padrões estabelecidos na legislação.

2.5 SÍNTESE DO CAPÍTULO

A velocidade e os parâmetros hidráulicos do canal influenciam não somente a distribuição de poluentes particulados e dissolvidos na água, como também agem diretamente sobre processos cinéticos, como a reaeração. O conhecimento acerca dos parâmetros de reação ainda é limitado em muitos ambientes, uma vez que o papel da ação química e biológica sobre a distribuição de substâncias é mais difícil de quantificar, e há carência de dados na maioria dos estudos. Este é um problema evidente também para a calibração dos modelos.

Devido às condições de estabilidade, a aplicação de esquemas explícitos é relativamente pouco discutida e tem-se priorizado o uso de soluções implícitas (Juxiang *et al.*, 2011). Contudo, as restrições para uso de métodos explícitos são contornadas com o nível de processamento atual, sendo interessante uma análise de seu uso para as soluções dos modelos hidrodinâmico e de qualidade da água.

A modelagem matemática tem sido muito utilizada nos estudos ligados à qualidade da água, porém as implicações da abordagem não-permanente sobre os instrumentos de gestão de recursos hídricos ainda são pouco exploradas, assim como as vantagens do uso da curva de permanência. Além disso, grande parte dos estudos voltados à simulação transiente trata de

estuários, onde os efeitos da inversão de fluxo são mais aparentes em termos de qualidade de água.

3 CARACTERIZAÇÃO GERAL DO RIO IGUAÇU

A bacia do Alto Iguaçu localiza-se na região metropolitana de Curitiba (RMC), entre as latitudes $25^{\circ}13'48'' S$ e $25^{\circ}49'48'' S$ e longitudes $48^{\circ}57'36'' O$ e $49^{\circ}41'24'' O$. O rio Iguaçu nasce na Serra do Mar, e estende-se por aproximadamente 90 km até o limite da RMC, com uma área de drenagem de cerca de 3000 km².

No ano de 2007 a população pertencente à bacia era de 3 milhões de habitantes, distribuídos em 14 municípios. Esse local concentra em torno de 30% da população urbana do estado do Paraná, com baixos índices de coleta e tratamento de esgoto. Em relação aos aspectos físicos, é uma região predominantemente plana, com uma grande extensão de várzeas naturais em ambas as margens do rio principal, configurando planícies de inundação bem definidas. Há, ainda, atividades de extração de areia nas cavas existentes nas áreas mais planas dessas várzeas inundáveis (Fernandes, 2013). No trecho estudado, o rio Iguaçu está atualmente incluído na classe 2 de enquadramento, como especificado pela portaria da SUREHMA n° 020/1992 (SUREHMA, 1992).

Nesta pesquisa são utilizados dados de cinco estações de monitoramento instaladas ao longo do rio, que fazem parte de um sistema mantido pelo Instituto das Águas do Paraná. Os pontos IG2, IG3, IG4, IG5 e IG6, identificados na figura 3, ficam situados respectivamente nas estações: Ponte BR 277 (65009000), Ponte do Umbarazinho (65017006), ETE Cachoeira (65019980), Ponte do Guajuvira (65025000) e Balsa Nova (65028000).

Na tabela 6 são descritas as áreas de drenagem e a localização dos pontos estudados. Destaca-se que no trecho entre IG4 e IG5 o rio passa de uma condição retilínea para meandrosa, sendo IG6 uma região com planícies de inundação.

TABELA 6 – Identificação dos pontos de monitoramento no rio Iguaçu

PONTO	ÁREA DE DRENAGEM (km ²)	LATITUDE	LONGITUDE	ALTITUDE (m)
IG2	625	25°29'00''S	49°11'21''O	869
IG3	1283	23°35'56''S	49°15'39''O	865
IG4	2122	25°36'01''S	49°23'52''O	860
IG5	2577	25°36'01''S	49°30'48''O	858
IG6	3048	25°35'14''S	49°37'54''O	854

FONTE: Knapik (2009)

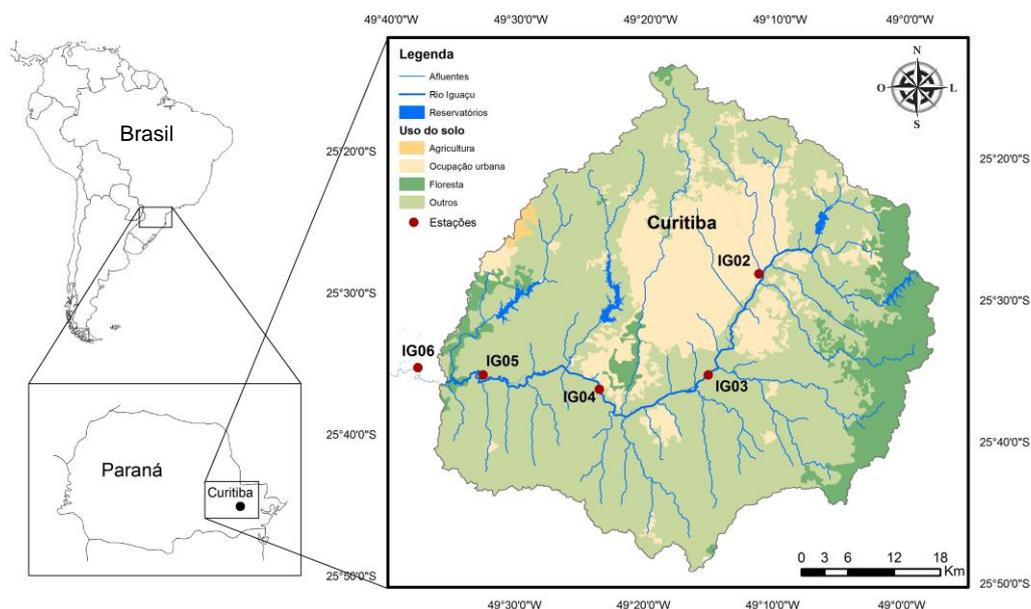


FIGURA 3 – Localização dos pontos de monitoramento no rio Iguaçu
 FONTE: Knapik (2014)

Os pontos IG2, IG3 e IG4, inseridos na área de ocupação urbana, recebem significativos aportes de efluentes domésticos e industriais, e contribuições por escoamento superficial. As seções IG5 e IG6 drenam uma região agrícola, e recebem vazões de tributários menos impactados do que no trecho a montante (Knapik, 2014). Isso é verificado na figura 4, que apresenta dados monitorados de 2005 a 2013 na forma de *box plots* para DBO e OD.

Os pontos IG2 e IG3, que recebem a maior entrada de cargas externas, possuem as mais altas concentrações para DBO do trecho estudado (medianas de 14,63 e 12,96 mgO₂/L, respectivamente), enquanto o oxigênio nesse trecho diminui; entre IG4 e IG5 a poluição orgânica diminui, e os níveis de OD aumentam. O ponto IG2 tem valores altos para oxigênio devido à reaeração gerada pela entrada de tributários e velocidades de fluxo maiores.

Para DBO, destaca-se que os *box plots* dos pontos IG4, IG5 e IG6 apresentam uma assimetria positiva mais acentuada, indicando uma maior frequência de dados com concentrações mais baixas. O mesmo é observado para OD no ponto IG2, enquanto na seção IG6 a assimetria é negativa, com predomínio de eventos de maiores concentrações.

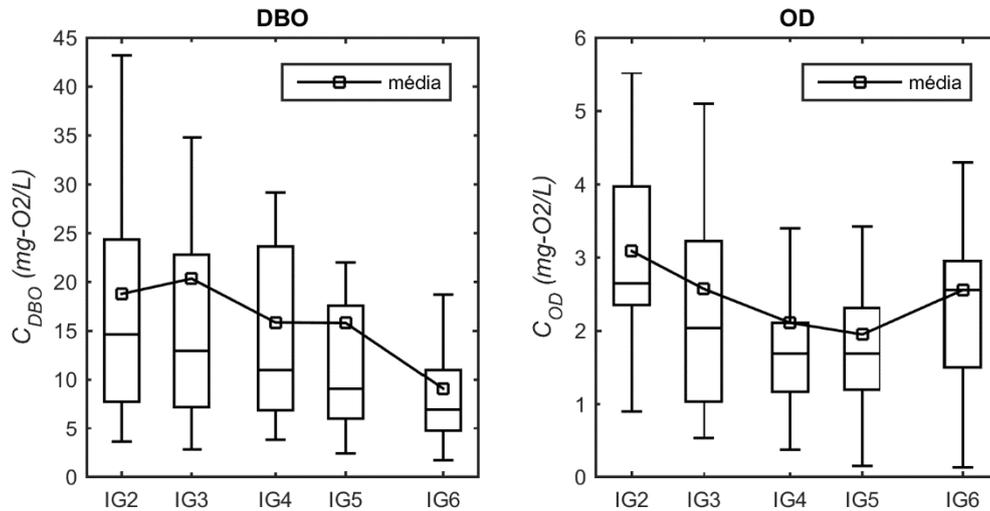


FIGURA 4 – Box plots dos dados de concentração observados nos anos de 2005 a 2013

A bacia do Alto Iguaçu tem sido objeto de diversas pesquisas relacionadas à qualidade da água, que incluem: estratégias de monitoramento (Gonçalves, 2011; Coelho, 2013), modelagem estatística (Villa, 2008; França, 2009; Almeida *et al.*, 2013), conceitos legais e financeiros (Brites, 2010), modelagem de qualidade da água (Bizzoni, 2000; Bäumle, 2004; Knapik, 2009; Knapik, 2014), ferramentas de suporte a decisões e calibração (Kondageski, 2008; Nahon, 2009), e estratégias de planejamento e gestão de recursos hídricos (Przybysz, 2007).

No entanto, apesar dos avanços no entendimento da dinâmica desse sistema, esses estudos destacam a importância de integrar os conceitos quali-quantitativos em bacias críticas, de modo a gerar informações que auxiliem a calibração de modelos, as estratégias de monitoramento e a avaliação dos dados.

4 SOLUÇÃO DOS MODELOS HIDRODINÂMICO E DE QUALIDADE DA ÁGUA

“If we compare our knowledge on advection, dispersion, and their hydraulic backgrounds on the one side and conversion processes (mostly related to chemistry and biology) on the other side, clearly we are much weaker on the latter ‘soft’ field. Here data collection, experimentation, and general empirical knowledge play a decisive role in identifying the model or submodel structure, and in performing model calibration and validation. This is particularly the case if we consider the uncertainties inherent in field data, model structure, and parameter values”

REICHERT, P.; *et al.* **River Water Quality Model No. 1**. IWA Publishing: London, 2001.

Devido ao comportamento numérico distinto das equações, e a diferenças de magnitude dos diversos termos envolvidos, Atkinson *et al.* (1998) sugerem que diferentes esquemas de solução podem ser mais apropriados para um modelo em relação ao outro. Esta foi a abordagem adotada nesta pesquisa, assim como em outros estudos semelhantes (Garcia e Tucci, 2000; Mannina e Viviani, 2010; Rocha e Pitombeira, 2013). O método difusivo de Lax foi aplicado para a solução das equações de Saint-Venant, enquanto o método FTCS (Forward-Time/Centered-Space) foi utilizado para solução do módulo de transporte.

O esquema de desenvolvimento da pesquisa é apresentado na figura 5.

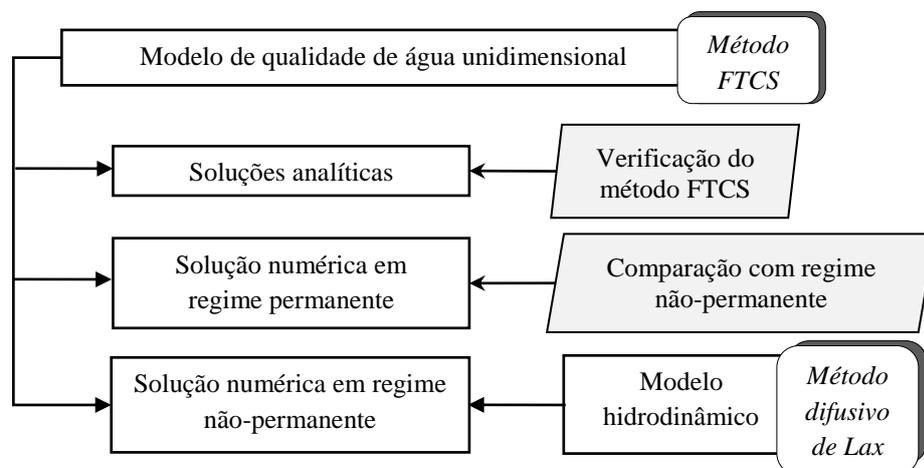


FIGURA 5 – Esquema proposto para desenvolvimento das análises

Inicialmente foram resolvidas as equações de Saint-Venant, que forneceram as velocidades de escoamento na direção longitudinal e a área das seções transversais. Posteriormente esses resultados foram utilizados no modelo de qualidade de água. Essa solução em duas fases é possível porque se considera que a substância estudada não afeta o escoamento no rio ou as propriedades do fluido.

Em uma etapa intermediária da pesquisa foram realizados testes com soluções analíticas conhecidas da equação de advecção-dispersão. A comparação dessas soluções com resultados do modelo numérico permite conferir se o código computacional e o método proposto são apropriados para resolver a equação governante, e definir os requerimentos de estabilidade para modelos mais complexos. Mesmo sendo situações simplificadas, tais testes são importantes para identificar possíveis erros nas soluções. Para Alshawabkeh e Adrian (1997), soluções analíticas ainda estendem o número de condições de contorno que podem ser aplicadas para descrever alguns problemas reais de engenharia.

A escolha do método FTCS para comparação com soluções analíticas foi motivada pelo teste apresentado no Apêndice A, uma vez que esse esquema gerou resultados mais exatos que os métodos de Lax-Friedrichs e *Upwind*. No Apêndice B é também apresentada uma verificação de solução do modelo hidrodinâmico pelo método difusivo de Lax.

Posteriormente são apresentadas simulações de qualidade de água em regime permanente, com o método de diferenças finitas centradas e dados do rio Iguaçu. Por fim, a modelagem e análise para estado não-permanente foram realizadas através do esquema sintetizado na figura 6.

Devido a disponibilidade de dados, o ano de 2010 foi selecionado para as simulações. A análise de um ano completo permite representar as mudanças sazonais e o balanço de massa no sistema (uma vez que as cargas externas são dadas em kg/ano).

As simulações numéricas foram implementadas no *software* Matlab®, e os códigos computacionais são apresentados no Apêndice C.

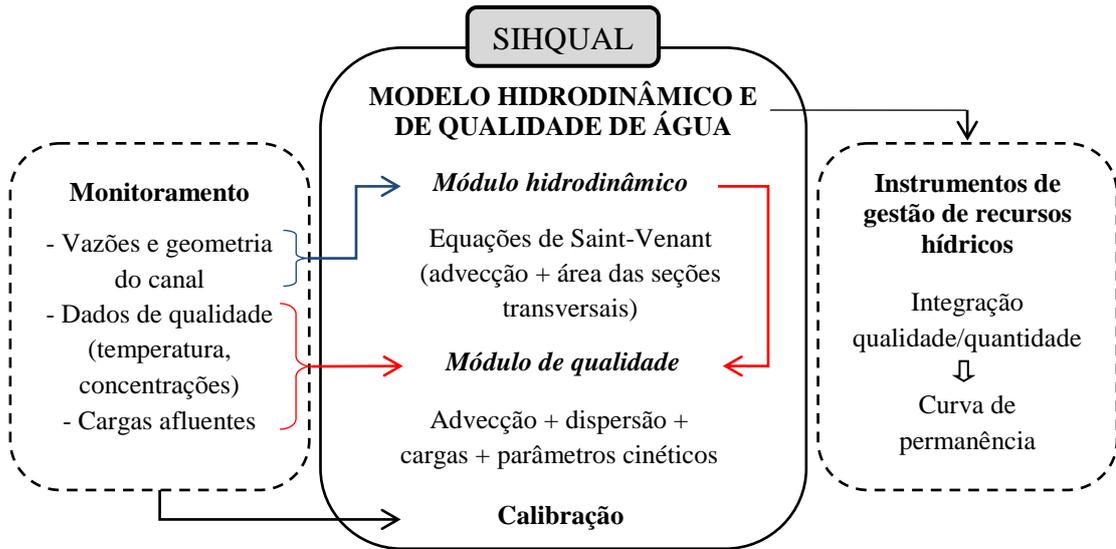


FIGURA 6 – Síntese do desenvolvimento dos modelos hidrodinâmico e de qualidade de água

4.1 DISCRETIZAÇÃO DOS MODELOS

4.1.1 Equações de Saint-Venant

Aplicando-se o método difusivo de Lax à expressão para continuidade, representada pela equação (1), tem-se:

$$B^* \left\{ \frac{y_i^{k+1} - [\alpha y_i^k + (1-\alpha) y^*]}{\Delta t} \right\} + U^* B^* \left(\frac{y_{i+1}^k - y_{i-1}^k}{2\Delta x} \right) + U^* \left(\frac{A_{i+1}^k - A_{i-1}^k}{2\Delta x} \right) + A^* \left(\frac{U_{i+1}^k - U_{i-1}^k}{2\Delta x} \right) = q_i^k \quad (19)$$

onde $B^* = (B_{i-1}^k + B_{i+1}^k)/2$, $y^* = (y_{i-1}^k + y_{i+1}^k)/2$, $U^* = (U_{i-1}^k + U_{i+1}^k)/2$ e $A^* = (A_{i-1}^k + A_{i+1}^k)/2$.

Isolando o termo y_i^{k+1} na equação (19), tem-se uma equação explícita para o cálculo da profundidade do canal:

$$y_i^{k+1} = \alpha y_i^k + (1-\alpha) y^* - \frac{U^* \Delta t}{2\Delta x} (y_{i+1}^k - y_{i-1}^k) - \frac{U^* \Delta t}{B^* 2\Delta x} (A_{i+1}^k - A_{i-1}^k) - \frac{A^* \Delta t}{B^* 2\Delta x} (U_{i+1}^k - U_{i-1}^k) + \frac{q_i^k \Delta t}{B^*} \quad (20)$$

Aplicando o mesmo esquema à equação (2), para conservação de momento:

$$\frac{U_i^{k+1} - [\alpha U_i^k + (1-\alpha)U^*]}{\Delta t} + U^* \left(\frac{U_{i+1}^k - U_{i-1}^k}{2\Delta x} \right) + g \left(\frac{y_{i+1}^k - y_{i-1}^k}{2\Delta x} \right) = \frac{q_i^k (v_L - U^*)}{A^*} + g(S_0 - S_f^*) \quad (21)$$

onde $S_f^* = (S_f^{k_{i-1}} + S_f^{k_{i+1}})/2$, e S_0 variando ao longo do espaço.

Rearranjando os termos da equação (21), obtém-se uma expressão para o cálculo da velocidade no instante t_{k+1} com base nos valores do tempo t_k :

$$U_i^{k+1} = \alpha U_i^k + (1-\alpha)U^* - \frac{U^* \Delta t}{2\Delta x} (U_{i+1}^k - U_{i-1}^k) - \frac{g \Delta t}{2\Delta x} (y_{i+1}^k - y_{i-1}^k) + \frac{q_i^k (v_L - U^*)}{A^*} \Delta t + g \Delta t (S_0 - S_f^*) \quad (22)$$

As condições iniciais requeridas para solução das equações (20) e (22) são profundidade, velocidade e geometria do canal para o instante $t = 0$ ao longo do canal. As condições de contorno compreendem essas mesmas propriedades nas seções de montante e jusante, conhecidas em todo o tempo simulado.

Considerando seções transversais trapezoidais, na definição das condições iniciais e de contorno utilizou-se o seguinte procedimento:

- i. inclinação do talude (z) das seções IG2 e IG6 são fornecidas e, através de interpolações lineares, obteve-se as inclinações das seções intermediárias; o mesmo foi realizado para a largura do fundo (b), para a qual há valores conhecidos nas seções IG2, IG3, IG4, IG5 e IG6;
- ii. os hidrogramas observados das seções de montante e jusante para o período simulado são conhecidos; tendo-se as vazões em IG2 e IG6 no instante $t = 0$, com as equações da curva chave obteve-se a profundidade de escoamento; também com essas vazões tem-se a velocidade inicial em IG2 e IG6;
- iii. conhecendo-se y , B , A e U nas seções IG2 e IG6 para o instante $t = 0$, utilizou-se interpolações lineares para obter essas mesmas características nas seções intermediárias.

4.1.2 Equação de advecção-dispersão-reação

4.1.2.1 Regime permanente

O modelo de qualidade de água permanente é obtido ao anular o termo $\partial C/\partial t$ na equação (5). Na figura 7 é representado o balanço de massa simulado em cada volume de controle i para a solução em regime permanente, que varia apenas no espaço.

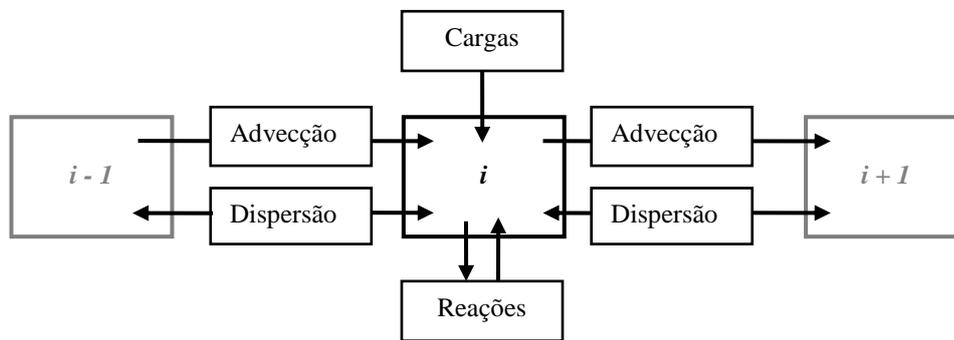


FIGURA 7 – Balanço de massa em um volume de controle para um determinado período de tempo
 FONTE: adaptado de Chapra (1997)

Aplicando-se o método de diferenças finitas com representação em diferenças centradas a equação (5), sem o termo $\partial C/\partial t$, tem-se:

- (i) Demanda bioquímica de oxigênio

$$U_i \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{D}{A_i} \frac{A_{i+1} - A_{i-1}}{2\Delta x} \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x} - D \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{(\Delta x)^2} - [-(K_d + K_s)C_i + CARGAS] = 0 \quad (23)$$

Desenvolvendo a equação (23) e rearranjando os termos:

$$\left[-\frac{U_i}{2\Delta x} + \frac{D}{A_i} \frac{A_{i+1} - A_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{D}{(\Delta x)^2} \right] C_{i-1} + \left[\frac{2D}{(\Delta x)^2} + (K_d + K_s) \right] C_i + \left[\frac{U_i}{2\Delta x} - \frac{D}{A_i} \frac{A_{i+1} - A_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{D}{(\Delta x)^2} \right] C_{i+1} = CARGAS \quad (24)$$

(ii) Oxigênio dissolvido

$$U_i \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{D}{A_i} \frac{A_{i+1} - A_{i-1}}{2\Delta x} \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x} - D \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{(\Delta x)^2} - [K_a(O_s - C_i) - K_d C_{DBO} - K_4 / H - \alpha_5 \beta_1 N_1 - \alpha_6 \beta_2 N_2] = 0 \quad (25)$$

Na equação (25) os termos N_1 e N_2 variam ao longo do espaço. A expressão pode ser reescrita na forma:

$$\left[-\frac{U_i}{2\Delta x} + \frac{D}{A_i} \frac{A_{i+1} - A_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{D}{(\Delta x)^2} \right] C_{i-1} + \left[\frac{2D}{(\Delta x)^2} + K_a \right] C_i + \left[\frac{U_i}{2\Delta x} - \frac{D}{A_i} \frac{A_{i+1} - A_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{D}{(\Delta x)^2} \right] C_{i+1} = [K_a O_s - K_d C_{DBO} - K_4 / H - \alpha_5 \beta_1 N_1 - \alpha_6 \beta_2 N_2] \quad (26)$$

As equações (24) e (26) resultam em um sistema de equações lineares, resolvido pelo procedimento do algoritmo de Thomas (Hirsch, 1991). O intervalo de discretização espacial utilizado foi 25 m, valor suficiente para atender às condições de convergência do método, que determina que a matriz deva ser diagonalmente dominante.

Para a condição de contorno de jusante adotou-se a mediana dos valores medidos de concentração na seção IG6. Na condição de montante considerou-se fluxo de concentração nulo ($dC/dx = 0$).

4.1.2.2 Regime não-permanente

A solução do modelo de qualidade de água em regime não-permanente parte da aplicação do método FTCS à equação (5):

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} + U_i^k \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} - \frac{D}{A_i^k} \frac{A_{i+1}^k - A_{i-1}^k}{2\Delta x} \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} - D \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{(\Delta x)^2} \pm F = 0 \quad (27)$$

Isolando C_i^{k+1} , obtém-se:

$$C_i^{k+1} = C_i^k - \frac{U_i^k \Delta t}{2\Delta x} (C_{i+1}^k - C_{i-1}^k) + \frac{D\Delta t}{A_i^k} \frac{A_{i+1}^k - A_{i-1}^k}{2\Delta x} \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} + \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k) \pm F\Delta t \quad (28)$$

Como condição inicial foi considerada a mediana das séries medidas em cada ponto de monitoramento. Nos nós intermediários as concentrações foram obtidas através de interpolação linear.

Para a definição da condição de contorno de montante foi estipulada uma relação hipotética entre concentração e vazão, uma vez que séries temporais de concentração não estavam disponíveis. Considerou-se que os pares de concentração e vazão medidos são médias diárias e, através de interpolações, com as vazões observadas (também médias diárias) obteve-se as concentrações correspondentes. Deste modo, foi definida uma série contínua de concentração em função do tempo na seção de montante. A função de interpolação utilizada foi a *PCHIP* (Piecewise Cubic Hermite Interpolating Polynomial), definida pelo Matlab®. Essa é uma função muito similar a *spline*, porém com diferente declividade e mais suavizada. Com esse procedimento os resultados são obtidos rapidamente.

Os dados utilizados foram obtidos entre 2005 e 2013 (de 26 a 40 pares vazão-concentração, variando com o ponto de monitoramento), supondo que abrangem as faixas de variação de concentração e vazão que ocorrem naturalmente ao longo de um ano. Na seção de jusante considerou-se que as concentrações sejam iguais a da seção anterior simulada.

4.2 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO HIDRODINÂMICO

No módulo hidrodinâmico, o procedimento de solução consiste em determinar o hidrograma em um ponto do rio a partir do hidrograma conhecido em uma seção de montante. Deste modo, obtêm-se as variações de velocidade e área ao longo do tempo e do espaço.

Nas simulações o rio foi dividido em trechos uniformes, sendo I o ponto IG2 e J a seção de jusante, IG6. Os intervalos espacial e temporal definidos foram 500 m e 50 s,

respectivamente. Nesta configuração a condição de Courant é atendida, ao mesmo passo em que se garante economia de operações numéricas.

O parâmetro de calibração utilizado foi o coeficiente de rugosidade de Manning, ajustado para cada ponto conhecido. As simulações foram iniciadas com um valor característico para a área de estudos, e, por um procedimento de tentativa e erro, e com comparações entre dados medidos e simulados, obteve-se os valores requeridos. Essa calibração foi baseada no coeficiente de Nash-Sutcliffe, E_{ns} (Nash e Sutcliffe, 1970):

$$E_{ns} = 1 - \frac{\sum_{t=1}^N (Q_{obs}(t) - Q_{sim}(t))^2}{\sum_{t=1}^N (Q_{obs}(t) - Q_{med})^2} \quad (29)$$

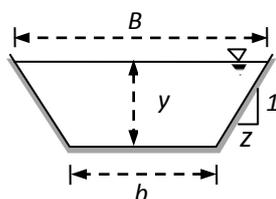
onde Q_{obs} é a vazão observada, Q_{sim} representa a vazão simulada com o modelo e Q_{med} é a média das vazões observadas no período $t = 1, 2, \dots, N$ (N sendo o número total de dados). O coeficiente E_{ns} , também chamado eficiência, varia de $-\infty$ a 1, com valor ótimo igual a 1.

4.2.1 Dados de entrada

4.2.1.1 Seções transversais

As seções transversais nos pontos de monitoramento foram aproximadas pelo formato trapezoidal, assumindo que as mesmas sejam simétricas. Deste modo, as informações requeridas são largura do fundo (b) e inclinação do talude (z). As fórmulas utilizadas no cálculo das principais características hidráulicas das seções são apresentadas na tabela 7.

TABELA 7 – Características hidráulicas da seção trapezoidal



ÁREA (A)	PERÍMETRO MOLHADO (P)	LARGURA DO TOPO (B)	RAIO HIDRÁULICO (R_H)
$by + zy^2$	$b + 2y(1 + z^2)^{1/2}$	$b + 2zy$	A/P

Os valores de largura do fundo e inclinação do talude foram estimados a partir das seções transversais medidas, e são exibidos na tabela 8. Considerou-se ainda que esses valores não variam ao longo do intervalo de tempo analisado.

TABELA 8 – Inclinação do talude e largura do fundo das seções transversais

Ponto	IG2	IG3	IG4	IG5	IG6
Inclinação do talude z (m/m)	2,0	2,1	2,2	2,3	2,4
Largura do fundo b (m)	16	19	40	41	45

As declividades S_0 para os trechos de IG2 a IG3, IG3 a IG4 e IG5 a IG6 foram estimadas pela relação entre a altitude e a distância entre os pontos. No intervalo entre os pontos IG4 e IG5, o rio passa de retilíneo para meandroso e, portanto, ocorre uma diminuição da declividade. Devido às incertezas associadas a esse valor, nesse trecho optou-se estimar S_0 por calibração. Na tabela 9 são apresentadas as distâncias entre os pontos de monitoramento e os valores de S_0 obtidos para cada trecho.

TABELA 9 – Distância e declividade do canal entre os pontos de monitoramento

TRECHO	DISTÂNCIA (m)	S_0 (m/m)
IG2 a IG3	18175	0,00022
IG3 a IG4	21855	0,00023
IG4 a IG5	18256	0,00022
IG5 a IG6	25443	0,00016
<i>Total</i>	83730	

4.2.1.2 Curvas-chave

As observações de cotas linimétricas e medições de vazão foram realizadas de 1973 a 2013 nos pontos IG2, IG3, IG5 e IG6, e de 1999 a 2012 no ponto IG4. Entretanto, os dados disponíveis não contemplam a amplitude de vazões máximas atingidas e, portanto, foi necessária a extrapolação das curvas de descarga. O método de extrapolação utilizado foi o método logarítmico, em que a relação entre vazão e profundidade é aproximada pela expressão (Jacon e Cudo, 1989):

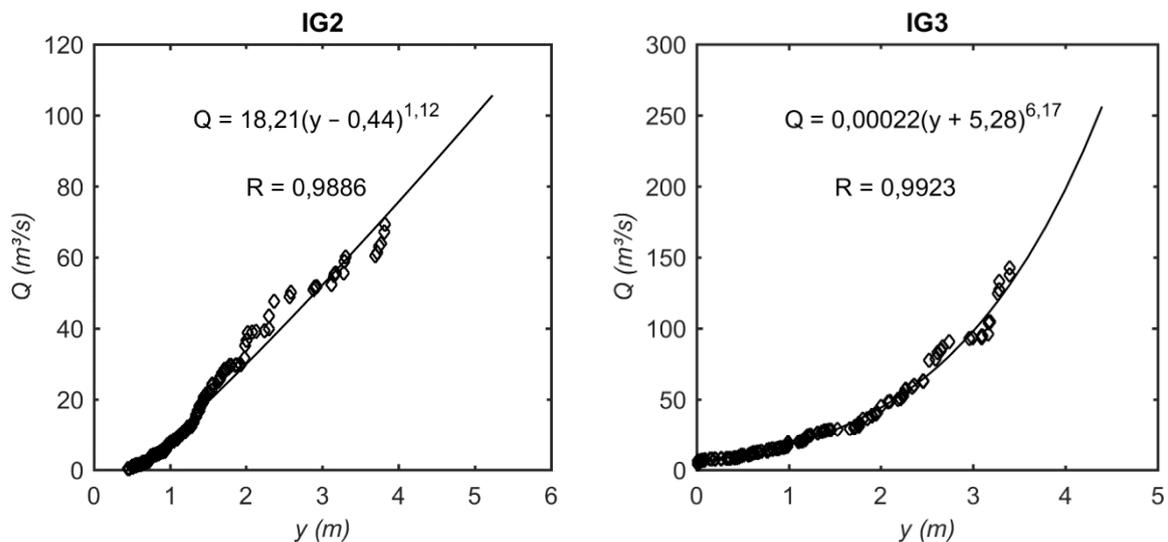
$$Q = a(y - y_0)^r \quad (30)$$

onde y é a cota para a descarga Q , y_0 representa a cota para uma descarga nula, e a e r são constantes.

Como as cotas são tomadas com relação a um referencial arbitrário (fixado e materializado na superfície), y_0 constitui um parâmetro desconhecido, que pode ser entendido como sendo a leitura do nível da água na régua para o qual a vazão é zero (Porto *et al.*, 2001).

O método logarítmico é um dos mais utilizados devido a sua simplicidade, e é adequado para extrapolações do trecho superior da curva chave (Pereira *et al.*, 2003). O procedimento fundamenta-se nas equações do movimento uniforme, supondo uma seção transversal regular. Neste trabalho foi considerado que essa aproximação representa suficientemente bem as condições do rio Iguaçu.

Para determinar os parâmetros a , r e y_0 é necessário um cálculo iterativo: inicialmente foram atribuídos valores aleatórios a esses coeficientes, e calculou-se a vazão com os níveis observados; fez-se a soma da diferença ao quadrado entre essas vazões calculadas e as medidas diretamente; determinou-se que y_0 fosse menor que o y_{\min} observado, e que a soma da diferença ao quadrado entre vazões calculadas e medidas fosse a menor possível; atendendo a essas especificações obtêm-se os valores procurados de a , b e y_0 . Na figura 8 são apresentadas as curvas-chaves e os coeficientes de correlação de Pearson (R) entre dados observados e ajustados com a expressão obtida em cada seção.



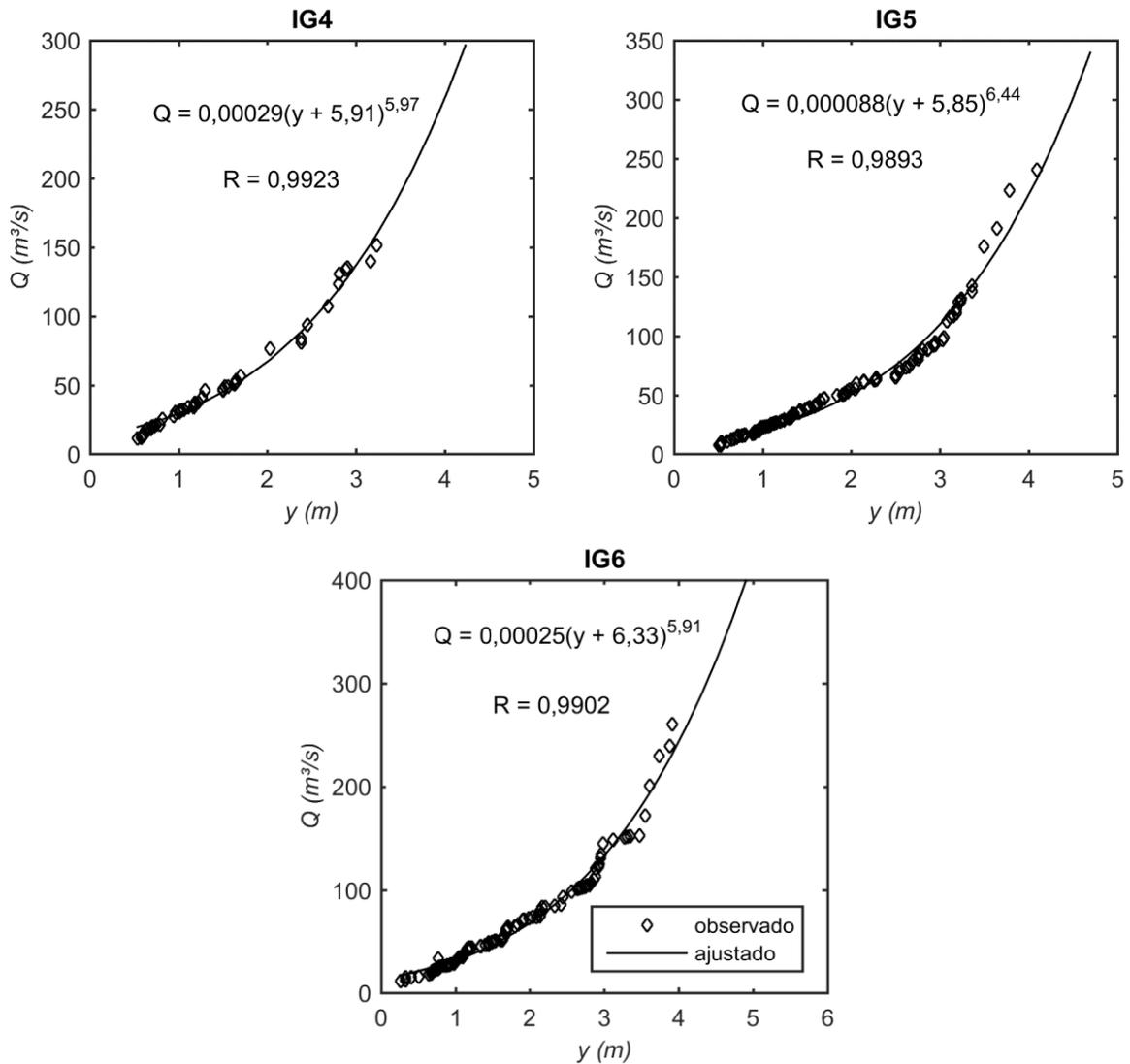


FIGURA 8 – Curvas-chave para os pontos de monitoramento

4.2.1.3 Hidrogramas

Os dados de vazão disponíveis são médias diárias, com séries em todos os pontos de monitoramento de setembro de 1999 a fevereiro de 2012. Para a calibração do modelo hidrodinâmico utilizou-se o ano de 2010, e 2011 para verificação. Os hidrogramas observados nesses períodos são apresentados na figura 9.

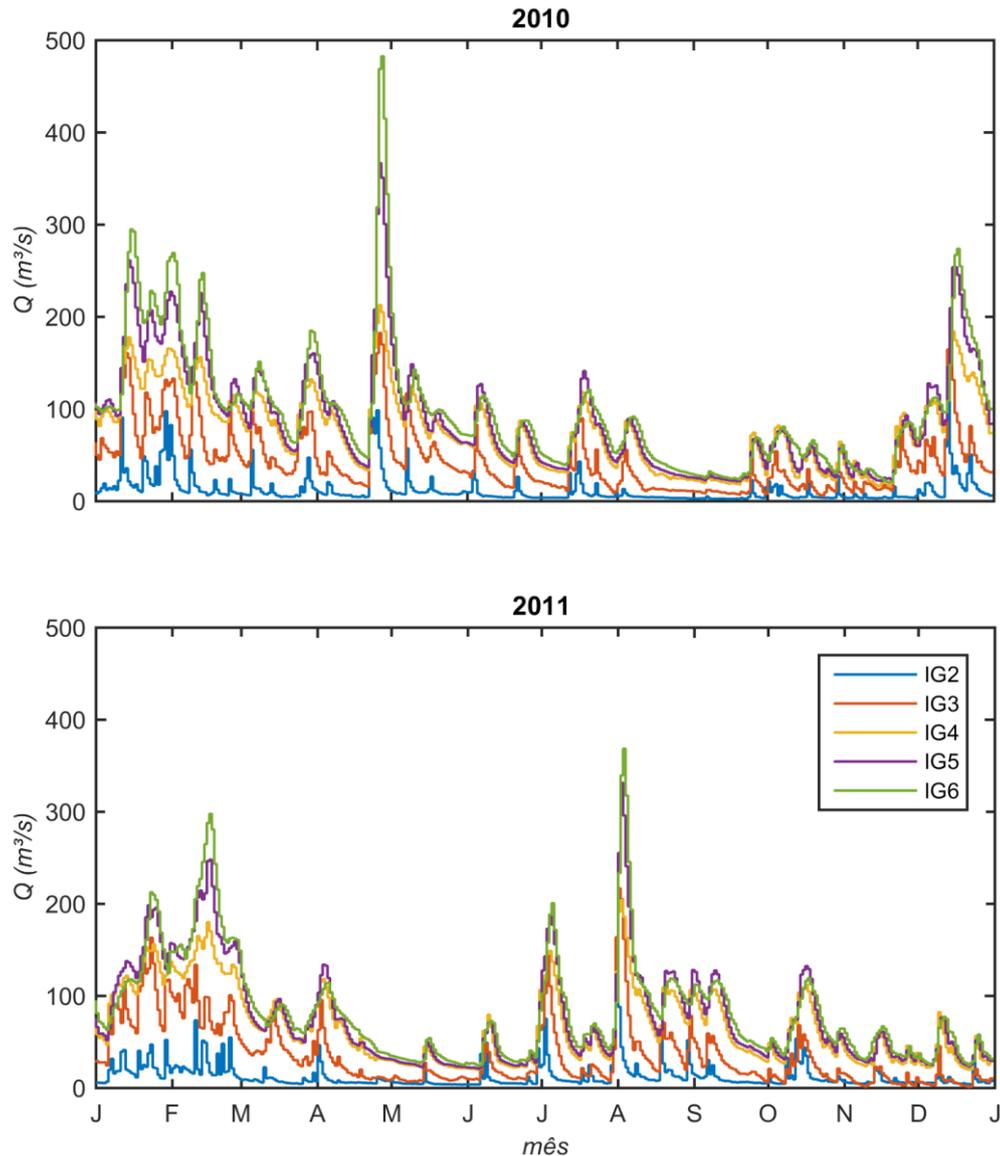


FIGURA 9 – Hidrogramas medidos nas estações e utilizados para calibração (2010) e verificação (2011)

A contribuição lateral foi estimada pela diferença entre os hidrogramas medidos nos pontos conhecidos, dividida pela distância entre os trechos estudados. Deste modo, o balanço total entre saídas e entradas de água no canal principal é avaliado. Considerou-se que essa contribuição lateral é distribuída de forma uniforme ao longo do comprimento do canal. Tendo em vista a insuficiência de informações, considerou-se ainda que a vazão lateral que entra ou sai ocorre com a mesma velocidade do rio principal.

4.2.2 Resultados

Os coeficientes de Manning calibrados para cada ponto são apresentados na tabela 10. Nas demais seções os valores para n foram determinados por interpolação linear. Observa-se que a variação espacial da rugosidade corresponde às mudanças de condições no rio, sendo o trecho de IG5 a IG6 (onde o canal passa a ter meandros) com maior resistência ao escoamento.

TABELA 10 – Coeficientes de rugosidade de Manning calibrados

PONTOS	COEFICIENTE n ($m^{-1/3}s$)
IG2	0,030
IG3	0,030
IG4	0,035
IG5	0,040
IG6	0,045

Os valores simulados e observados de vazão nos cinco pontos de monitoramento para os anos de 2010 e 2011 são comparados nas figura 10 e figura 11, respectivamente. Na tabela 11 são exibidos os coeficientes de Nash-Sutcliffe obtidos para as simulações.

Os resultados mostram que o modelo simula bem as oscilações das vazões no período considerado, com coeficientes de Nash-Sutcliffe variando de 0,80 no ponto IG5 a 0,97 no ponto IG3. Na figura 8, que apresenta os hidrogramas medidos, observa-se que o período de estiagem em 2010 se estende de agosto a novembro, enquanto 2011 exhibe o período mais seco entre os meses de abril e julho. Isso comprova que a calibração realizada reproduz de forma adequada as variações de um ano para outro.

A montante do ponto IG5 ocorrem mudanças das características hidráulicas, uma vez que o rio passa a ter meandros. Como o modelo propaga informações de IG2 para jusante, essas mudanças não são propriamente representadas. A variação de declividade do fundo do rio (S_0), ou mesmo as curvas-chave utilizadas, podem explicar a superestimação de alguns picos no hidrograma em IG5, que ocorreram principalmente na simulação do ano de 2010.

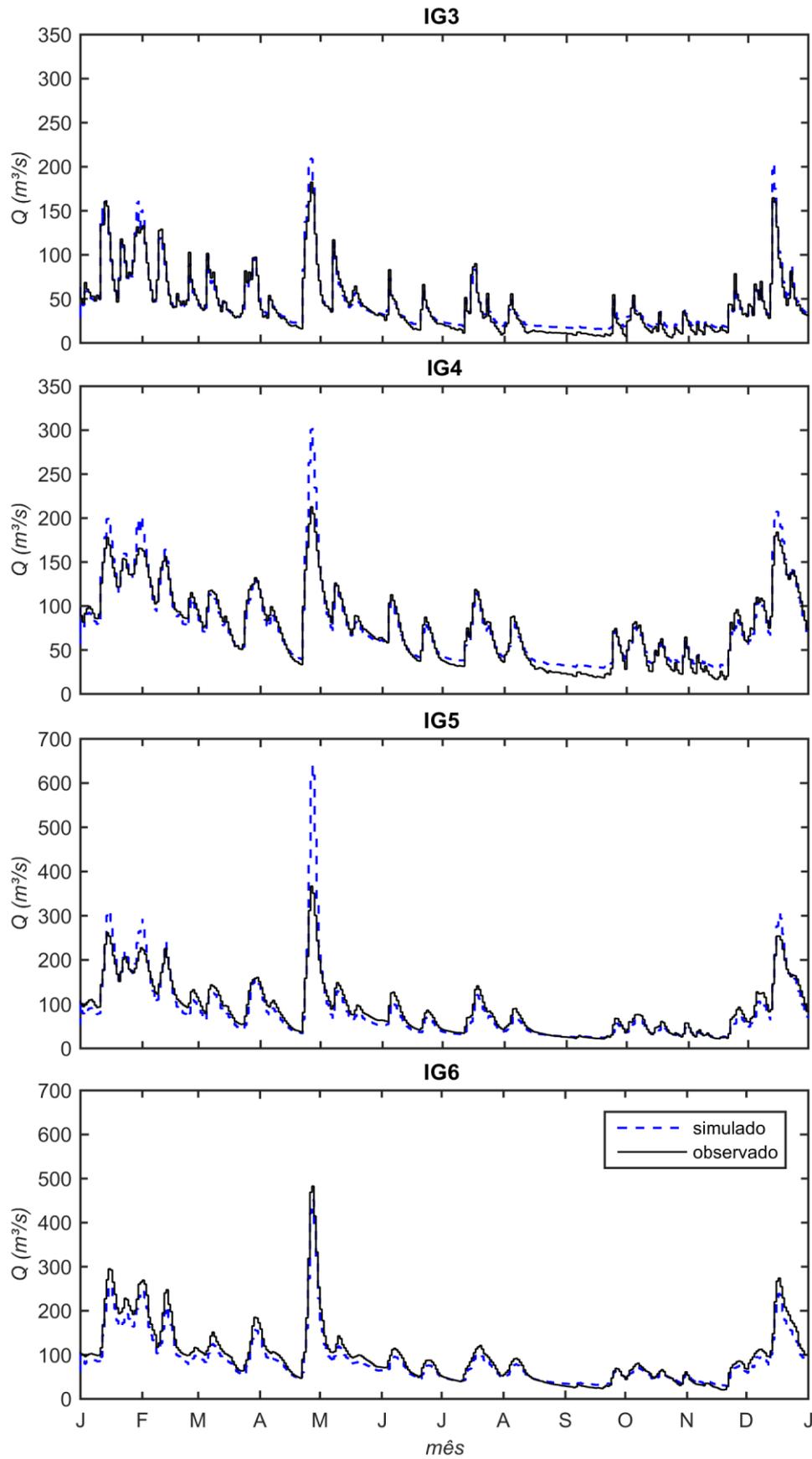


FIGURA 10 – Vazões medidas e simuladas para 2010 (calibração)

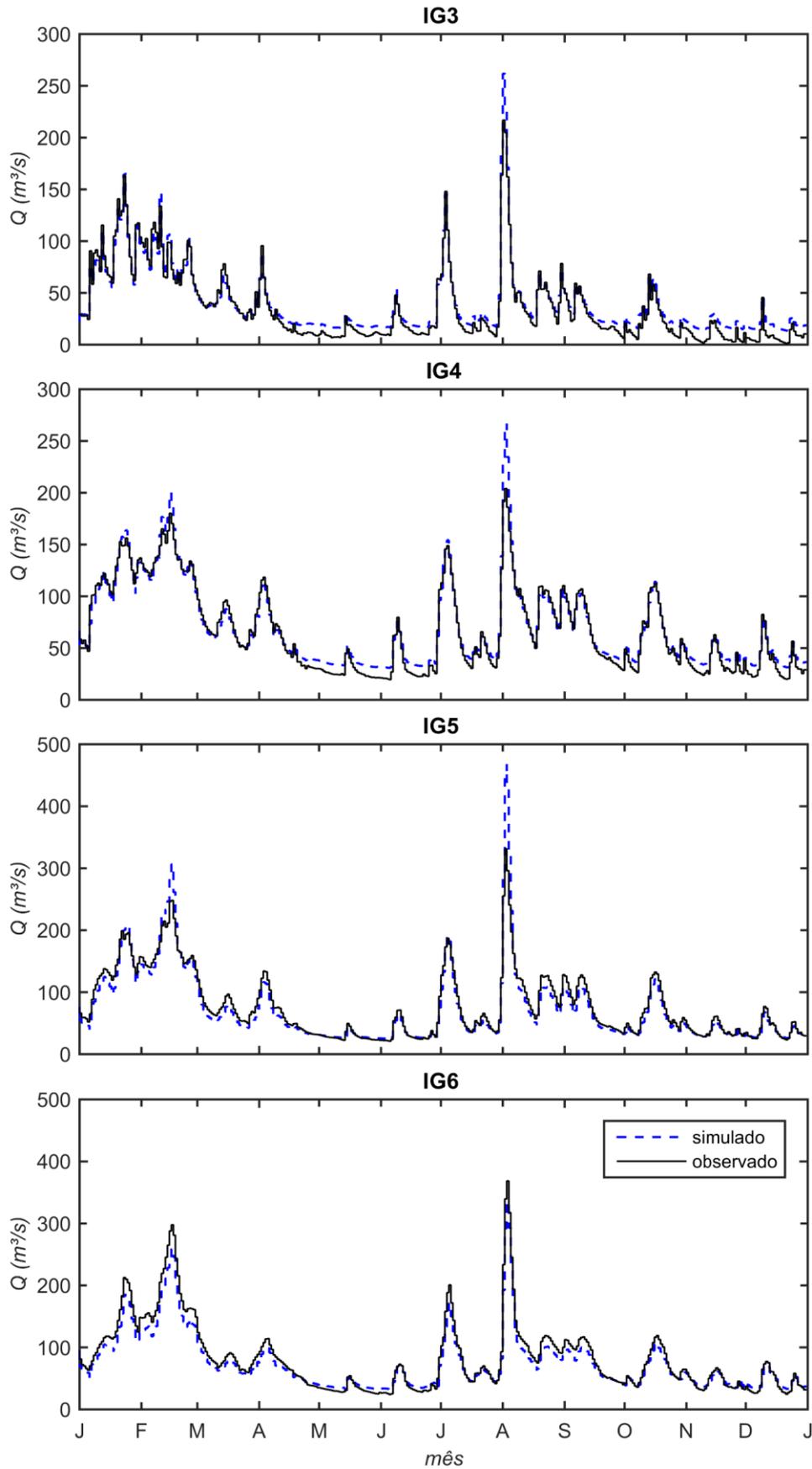


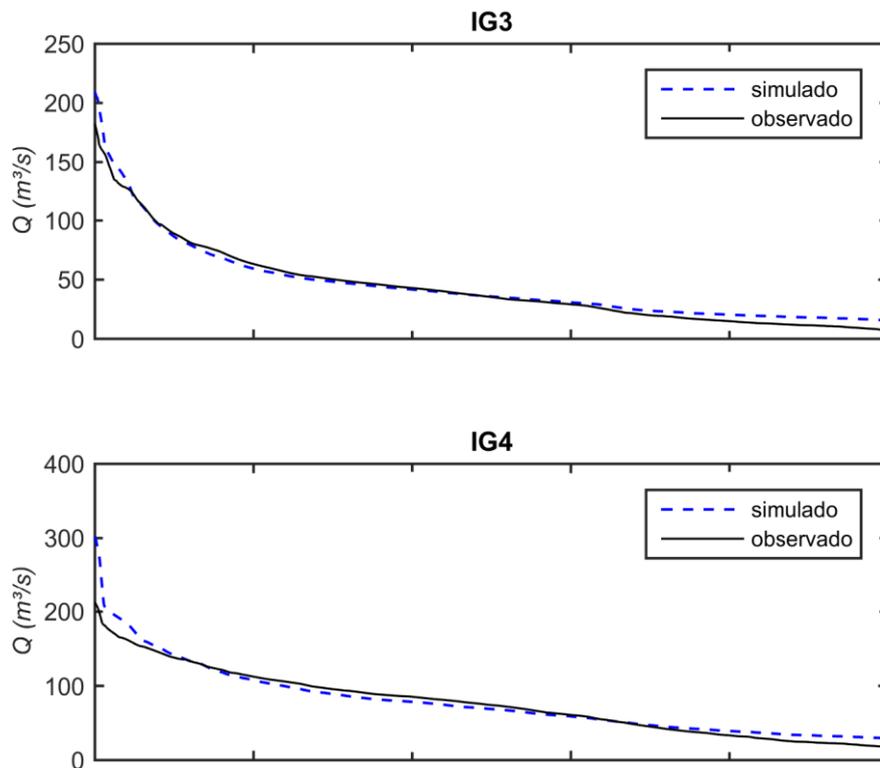
FIGURA 11 – Vazões medidas e simuladas para 2011 (verificação)

TABELA 11 – Coeficientes de Nash-Sutcliffe para as simulações

PONTOS	2010	2011
IG3	0,97	0,95
IG4	0,93	0,96
IG5	0,80	0,91
IG6	0,94	0,95

No Apêndice D são exibidos resultados das simulações também para os meses de janeiro e julho dos mesmos anos. Foram realizados, ainda, testes iniciais com simulações trecho a trecho, apresentados no Apêndice E.

Dispondo as vazões observadas e simuladas para 2010 em ordem decrescente e calculado a frequência acumulada associada a cada valor, obtém-se curvas de permanência em cada ponto, apresentadas na figura 12.



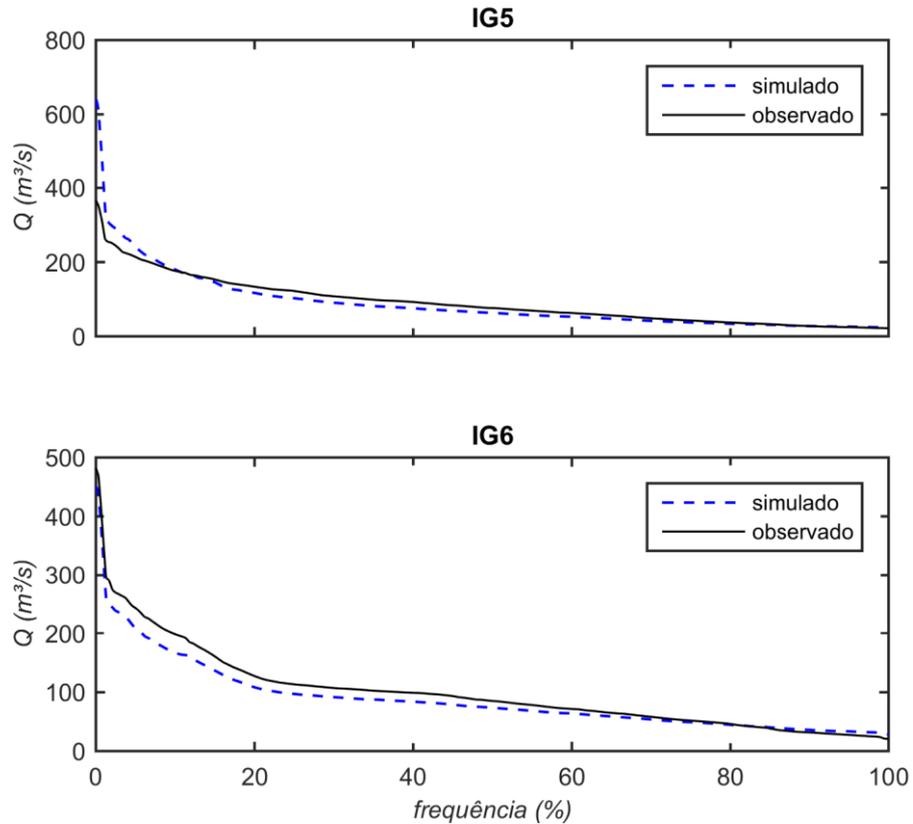


FIGURA 12 – Curvas de permanência com vazões simuladas e observadas para 2010

4.3 SOLUÇÕES ANALÍTICAS

Na literatura são propostas diversas soluções analíticas para a equação de advecção-dispersão, de acordo com as condições iniciais e de contorno. Os casos avaliados nesta pesquisa incluem um lançamento instantâneo e outro com condição de contorno periódica. Não foram considerados exemplos com decaimento ou entrada de cargas externas, avaliando-se somente o efeito do transporte (advecção e dispersão) sobre a distribuição de poluentes no corpo hídrico.

(a) Caso I

O primeiro teste conduzido refere-se a um lançamento em que a concentração passa instantaneamente de zero a um determinado valor. Essa condição é descrita como:

$$\begin{aligned}
C(x,0) &= 0 \quad \rightarrow \quad x \geq 0 \\
C(0,t) &= 1 \quad \rightarrow \quad t > 0 \\
C(\infty,t) &= 0 \quad \rightarrow \quad t > 0
\end{aligned} \tag{31}$$

No exemplo proposto o escoamento ocorre com velocidade constante ($U = 1,0$ m/s) em um canal prismático, com um coeficiente de dispersão $D = 0,01$ m²/s. Apesar de considerar um domínio semi-infinito, o problema foi resolvido considerando um comprimento $L = 7$ m.

A partir das simplificações impostas, a equação de transporte é escrita no seguinte formato:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} - D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \tag{32}$$

cuja solução numérica pelo método FTCS é dada por:

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} + U \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} - D \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{(\Delta x)^2} = 0 \tag{33}$$

Isolando C_i^{k+1} , tem-se:

$$C_i^{k+1} = C_i^k - \frac{U\Delta t}{2\Delta x} (C_{i+1}^k - C_{i-1}^k) + \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k) \tag{34}$$

A solução analítica para a equação (32) é dada por (Ogata e Banks, 1961):

$$C(x,t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x-Ut}{\sqrt{4Dt}} \right) + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{Ux}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x+Ut}{\sqrt{4Dt}} \right) \tag{35}$$

Na figura 13 são apresentados os resultados obtidos com as soluções analíticas e numéricas, para $\Delta x = 0,02$ m e $\Delta t = 0,002$ s.

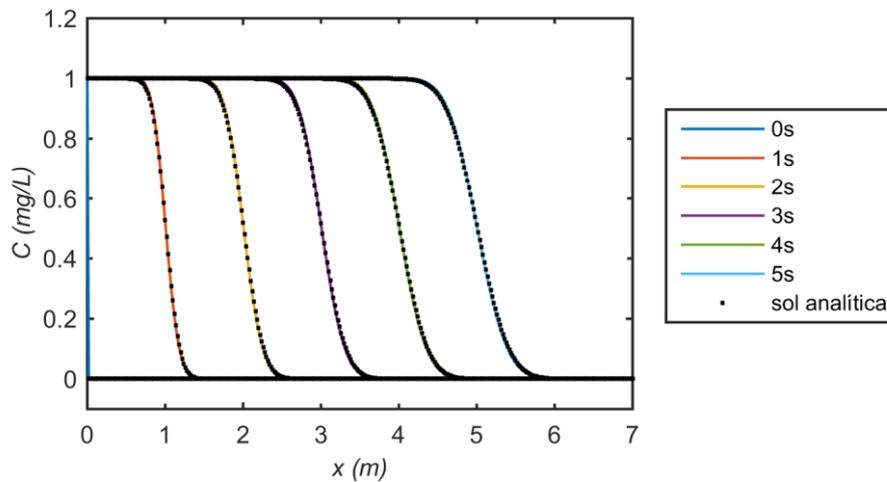


FIGURA 13 – Soluções numérica e analítica para o Caso I

Testes com diferentes intervalos de tempo e espaço também foram conduzidos, e os resultados são sintetizados na tabela 12. Os valores obtidos mostram que a acurácia dos resultados depende principalmente do intervalo Δt , e que uma relação $\Delta x/\Delta t = 10$ é adequada para o problema estudado; nesse caso, as condições de estabilidade para o método FTCS também são atendidas ($\lambda < 0,5$ e $\gamma < 1$).

TABELA 12 – Testes para o Caso I com diferentes intervalos de tempo e espaço

Δx	Δt	$\lambda = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2}$	$\gamma = \frac{U\Delta t}{\Delta x}$	<i>Erro médio absoluto*</i>
0,02	0,0200	0,5000	1,0000	0,0360
	0,0100	0,2500	0,5000	0,0106
	0,0050	0,1250	0,2500	0,0048
	0,0025	0,0625	0,1250	0,0024
	0,0020	0,0500	0,1000	0,0019
0,01	0,0050	0,5000	0,5000	0,0049
	0,0025	0,2500	0,2500	0,0023
	0,0020	0,2000	0,2000	0,0019

*diferença absoluta entre resultados analíticos e numéricos em $t = 5$ s

(b) Caso II

Em problemas envolvendo o lançamento de cargas contínuas, a condição de contorno de montante pode variar com o tempo. Alguns dos procedimentos propostos para avaliar tal

variação incluem funções periódicas representadas por transformadas de Fourier e métodos de superposição (Chapra, 1997; Shukla, 2002). Segundo Alshawabkeh e Adrian (1997), uma função senoidal representa de forma aproximada o efeito da variação diurna do lançamento de efluentes, como os provenientes de uma estação de tratamento.

Tryggvason (2013) propõe um exemplo numérico para esse caso, com a seguinte condição inicial:

$$C(x, 0) = \frac{1}{2} \text{sen}(2\pi x) \quad (36)$$

Aplicando o método FTCS à equação (32) nas seções de montante (seção 1) e jusante (seção J), tem-se:

$$C_1^{k+1} = C_J^{k+1} \quad (37)$$

$$C_J^{k+1} = C_J^k - \frac{U\Delta t}{2\Delta x} (C_2^k - C_{J-1}^k) + \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_2^k - 2C_J^k + C_{J-1}^k) \quad (38)$$

A partir dessas condições, a solução exata da equação (32) é definida:

$$C(x, t) = \exp(-4\pi^2 Dt) \frac{1}{2} \text{sen}[2\pi(x - Ut)] \quad (39)$$

As características do problema são: $U = 1$ m/s, $L = 2$ m, $D = 0,02$ m²/s, $\Delta t = 0,002$ s e $\Delta x = 0,02$ m. Nesta configuração as condições de estabilidade são $\lambda = 0,1$ e $\gamma = 0,1$. A figura 14 apresenta a comparação de resultados obtidos com o método FTCS e com a solução exata para $t = 100$ s (os valores negativos ocorrem devido à condição inicial oscilatória). O erro médio absoluto para esse instante de tempo foi de 0,0022 mg/L.

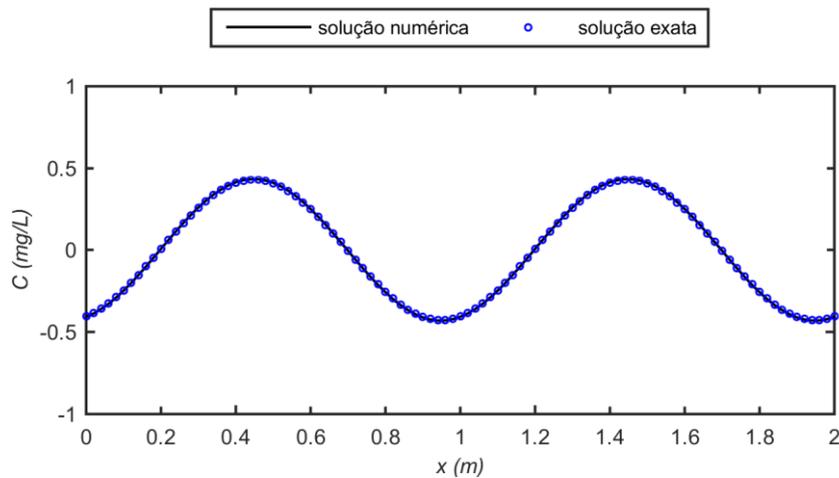


FIGURA 14 – Soluções numérica e exata para o Caso II

Apesar de representarem situações simples, sem reação ou cargas externas, os testes com soluções analíticas foram importantes na análise de verificação do algoritmo de solução da equação de advecção-dispersão-reação pelo método FTCS. A identificação de erros de programação e verificações de estabilidade foram realizadas a partir desses casos estudados.

4.4 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA

4.4.1 Dados de entrada

Ao longo do rio Iguaçu diversos afluentes contribuem para a alteração da vazão e da concentração de substâncias poluentes. As cargas orgânicas lançadas no canal principal foram estimadas a partir do método apresentado por Von Sperling (2006), com base nos dados de população de cada sub-bacia no ano de 2010. Foram consideradas apenas as contribuições domésticas, distribuídas de forma linear entre os trechos estudados. Na tabela 13 são exibidas as estimativas de carga de DBO utilizadas nos modelos em regime permanente e não-permanente. O detalhamento dos cálculos para obtenção desses valores foi apresentado por Knapik (2009).

TABELA 13 – Estimativa das cargas afluentes ao rio Iguazu para 2010

TRECHO	PONTO	CARGA DBO (kg/d)
Entre IG2 e IG3	Rio Belém	320,4
	ETE Belém	4726,4
	Canal Paralelo	320,4
	Rio Padilha	1953,6
	Rio Miringuava	366,9
	<i>Total</i>	7687,7
Entre IG3 e IG4	Rio Cotia	241,0
	Rio Divisa	974,9
	Rio Mascate	572,2
	Rio Mauricio	228,7
	Rio Barigui	7776,0
	Rio Faxinal	77,7
	ETE Costeira I e II	52,9
ETE Cachoeira	1158,0	
	<i>Total</i>	11081,6
Entre IG4 e IG5	Rio Passaúna	511,4
	Rio das Onças	39,6
	Rio Pianduva	66,7
	<i>Total</i>	617,8
Entre IG5 e IG6	Rio Isabel Alves	86,6
	Rio Verde	429,8
	<i>Total</i>	516,3

FONTE: adaptado de Knapik (2009)

Em projetos que envolveram a caracterização do rio Iguazu (Porto *et al.*, 2007; Fernandes *et al.*, 2013; Knapik, 2014), foram realizadas coletas de água nos anos de 2005 a 2013, com estimativas de vazão e medição de temperatura correspondentes. As amostras geraram dados de concentrações de DBO, OD, amônia e nitrito, entre outros parâmetros. Como para o ano de 2010 havia apenas entre quatro e cinco medições para essas variáveis, optou-se por utilizar valores médios de amônia, nitrito e temperatura.

As concentrações médias usadas nas simulações permanente e não-permanente para amônia (N_1) e nitrito (N_2) em cada ponto são apresentadas na tabela 14. Utilizou-se, ainda, um valor médio de oxigênio de saturação (O_s), igual a 9,53 mgO₂/L. Esse valor foi calculado a partir da equação (8), com as temperaturas medidas em campo (cuja média é 19,2°C).

TABELA 14 – Médias de concentração de amônia e nitrito observadas no rio Iguaçu entre 2005 e 2013

PONTOS	N_1 (mgN/L)	N_2 (mgN/L)
IG2	8,17	0,22
IG3	7,35	0,15
IG4	7,12	0,22
IG5	7,79	0,19
IG6	4,13	0,19

4.4.2 Calibração

O procedimento utilizado para a calibração dos modelos permanente e não-permanente segue exemplo do que foi realizado por Porto *et al.* (2007) e Knapik (2009) em simulação da qualidade da água para o rio Iguaçu com o modelo QUAL2E. O procedimento consistiu na combinação de valores de forma a reproduzir um cenário de concentração conhecido, representado pelo conjunto das observações de campo. Estes, por sua vez, foram organizados em gráficos do tipo *box plot*, e a calibração realizada por tentativa e erro. O critério adotado considerou ajuste ótimo a combinação de parâmetros que gerou resultados mais próximos à mediana dos dados medidos em cada ponto.

Outros trabalhos relacionados à modelagem de qualidade de água utilizam essa aproximação, buscando uma tendência média de resultados, uma vez que dados registrados durante um período definido usualmente não estão disponíveis (Brites, 2010; Lins, 2012).

Nesta pesquisa buscou-se compatibilizar os valores dos parâmetros calibrados para os modelos em regime permanente e não-permanente. As variações dos coeficientes de reação com a temperatura e com o tempo não foram consideradas, assim como o efeito de ressuspensão de sedimentos.

A tabela 15 apresenta os coeficientes de reação K_d , K_s e K_4 calibrados. O coeficiente de reaeração foi avaliado de diferenças formas para os modelos permanente e não-permanente, e será discutido posteriormente.

TABELA 15 – Coeficientes de reação calibrados

PONTOS	K_d (d ⁻¹)	K_s (d ⁻¹)	K_4 (gO ₂ /m ² d)
IG2	0,70	0,30	1,5
IG3	0,70	0,30	1,5
IG4	0,30	0,30	1,0
IG5	0,20	0,15	0,5
IG6	0,20	0,15	0,5

Os valores dos coeficientes K_d , K_s e K_4 confirmam a baixa qualidade da água nos pontos IG2 e IG3 em relação aos demais trechos do rio. A variação dos parâmetros α_5 , α_6 , β_1 e β_2 usualmente não é avaliada e, portanto, foram calibrados valores constantes para todo o canal: $\alpha_5 = 3,5$ mgO₂/mgN; $\alpha_6 = 1,14$ mgO₂/mgN; $\beta_1 = 0,12$ d⁻¹ e $\beta_2 = 1,0$ d⁻¹.

Para o coeficiente de dispersão longitudinal determinou-se por calibração um valor médio $D = 20$ m²/s. Como a estabilidade do método FTCS depende do D , optou-se pelo uso de um coeficiente constante. No Apêndice F são apresentados alguns testes de sensibilidade realizados para esse parâmetro, variando as características geométricas das seções transversais.

4.4.3 Solução em regime permanente

Os dados de velocidade e de área para regime permanente foram obtidos a partir das médias dos resultados gerados pela solução das equações de Saint-Venant, desconsiderando a variação temporal. Considerou-se que essa hipótese não gera resultados significativamente diferentes dos métodos usuais, com o uso da equação de Manning, por exemplo.

Uma vez que os valores de velocidade e área estavam disponíveis a cada 500 m, foram realizadas interpolações lineares para entrada dessas variáveis no código computacional, que utilizou Δx de 25 m. A velocidade e a profundidade médias do canal nesse caso foram 0,55 m/s e 2,02 m, respectivamente.

As concentrações de DBO e OD simuladas para o rio Iguaçu são apresentadas nas figura 15 e figura 16, respectivamente, assim como os *box plots* gerados a partir dos dados coletados em campo de 2005 a 2013.

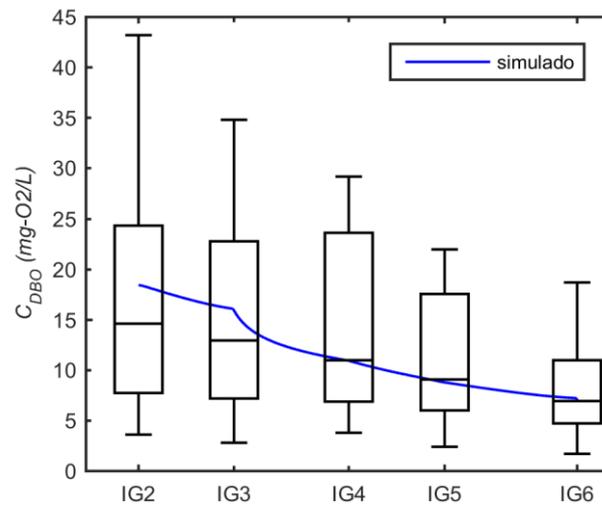


FIGURA 15 – Simulação de concentração de DBO em regime permanente

O modelo para OD se mostrou bastante sensível ao coeficiente K_a durante os testes para calibração. Foi utilizada a equação de O'Conner e Dobbins para determinar esse parâmetro em cada seção, cujas faixas de aplicabilidade, definidas anteriormente na tabela 5, foram atendidas.

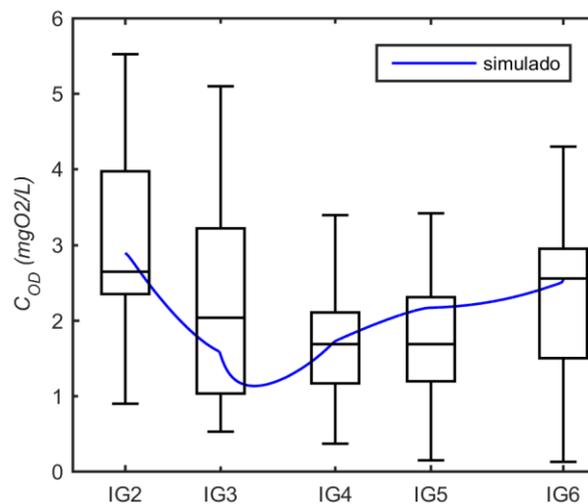


FIGURA 16 – Simulação de concentração de OD em regime permanente

Os resultados mostram que o modelo simula a variação de concentração ao longo do rio de forma adequada, com valores relativamente próximos à mediana dos dados medidos. O decaimento da concentração, consequência das variações de entradas laterais, diluição e transformações cinéticas, é acompanhado pelo modelo. Nos pontos IG2 e IG3, a condição de

contorno de montante adotada pode ter contribuído para que os valores de DBO simulados destoassem ligeiramente dos medidos.

As oscilações ao longo do rio, entretanto, não foram reproduzidas, uma vez que a carga externa foi considerada distribuída uniformemente entre os trechos, e a advecção não varia no tempo. Entre os pontos IG2 e IG3, que recebem as maiores contribuições externas, a concentração de OD diminui devido a maior quantidade de matéria degradável. A partir do trecho entre IG3 e IG4 a reaeração promove o aumento do oxigênio dissolvido disponível.

Outra forma de obter os resultados para regime permanente seria executar os modelos hidrodinâmico e de qualidade de água não-permanente até atingir uma condição estacionária, como realizado por Zou *et al.* (2006). No Apêndice G é apresentado um teste realizado a partir dessa abordagem. Para a aplicação com dados do rio Iguaçu, entretanto, em diversos pontos os resultados obtidos mostraram-se instáveis, e era necessário ajustar diferentes coeficientes de dispersão longitudinal para atender aos critérios de estabilidade do método FTCS. Diante disso, esse teste foi rejeitado nessa pesquisa.

4.4.4 Solução em regime não-permanente

A discretização espacial e temporal utilizada para resolução do modelo de qualidade foi a mesma do modelo hidrodinâmico ($\Delta x = 500$ m e $\Delta t = 50$ s), atendendo aos critérios de estabilidade definidos pelas equações (17) e (18).

Na simulação não-permanente de OD os mesmos coeficientes de reaeração calculados para o modelo de estado permanente geraram resultados superestimados de concentração, como observado na figura 17. Segundo Von Sperling (2007), valores elevados de K_a são obtidos em condições de baixa vazão. Ainda, Melching e Flores (1999) afirmam que, em condições de vazões de estiagem, a maioria dos corpos hídricos se comporta como uma sequência de poços e corredeiras, cujos valores de reaeração são altos. No modelo permanente, a vazão no rio variou de 9,61 a 82,23 m³/s, com média de 45,09 m³/s. Para o modelo não-permanente, por outro lado, essa variação ficou entre 2,54 e 450,86 m³/s, com média de 62,32 m³/s. Deste modo, valores mais altos de reaeração no modelo permanente são justificados.

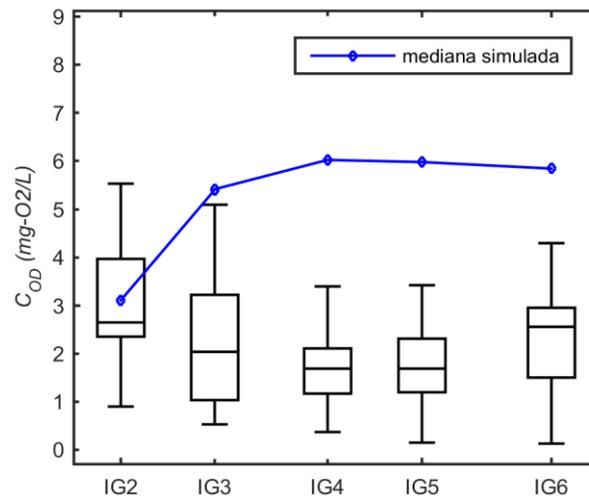


FIGURA 17 – Simulação de OD em regime não-permanente com coeficientes de reaeração utilizados no modelo permanente e *box plots* medidos

Diante dos resultados exibidos na figura 17, foram calibrados outros valores de reaeração para a simulação não-permanente, apresentados na tabela 16. Esta também contém os coeficientes de reaeração usados no modelo permanente. Nota-se que o efeito da variação temporal interfere significativamente na determinação desse parâmetro; no ponto IG2, o K_a utilizado para o modelo permanente é até oito vezes maior que no não-permanente.

TABELA 16 – Coeficientes de reaeração utilizados nos modelos de regime permanente e não-permanente

PONTOS	K_a (d ⁻¹)	
	PERMANENTE	NÃO-PERMANENTE
IG2	2,79	0,35
IG3	1,67	0,35
IG4	1,19	0,40
IG5	0,80	0,45
IG6	1,24	0,60

A comparação entre *box plots* de dados medidos e simulados é apresentada nas figuras 18 e 19 (os *outliers* não foram considerados). Observa-se que as medianas (utilizadas como parâmetro de calibração) ficaram relativamente próximas (diferença absoluta de 0,0166 mgO₂/L em IG5 a 0,4610 mgO₂/L em IG2 para OD; 0,2768 mgO₂/L em IG3 a 3,9281 mgO₂/L em IG2 para DBO).

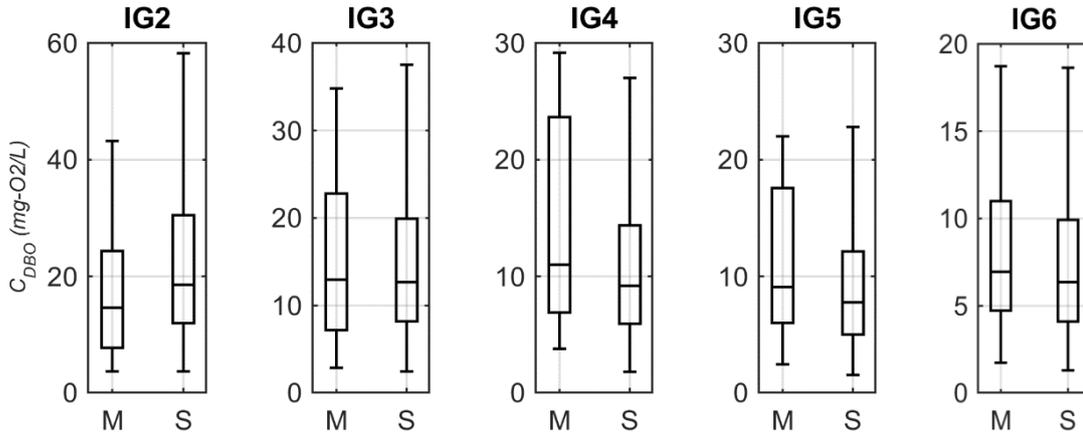


FIGURA 18 – Box plots medidos (M) e simulados (S) para DBO

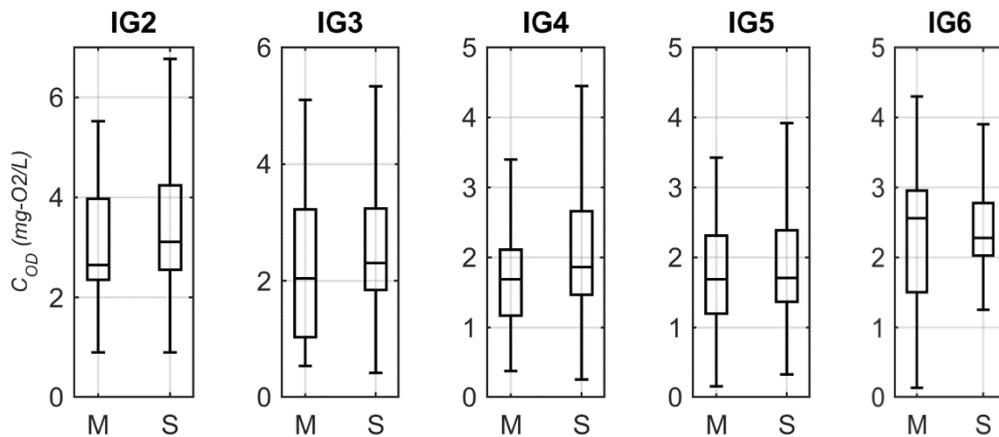


FIGURA 19 – Box plots medidos (M) e simulados (S) para OD

Na tabela 17 são exibidos os coeficientes de variação (CV) para os dados medidos e simulados, calculados a partir da razão entre desvio padrão e média. Observa-se que esses valores são altos, porém os resultados simulados se mostraram mais homogêneos do que os medidos, refletindo a menor variabilidade dos dados de monitoramento.

TABELA 17 – Coeficientes de variação para dados simulados e medidos

PONTOS	DBO		OD	
	CV MEDIDO	CV SIMULADO	CV MEDIDO	CV SIMULADO
IG2	77,61	53,67	43,05	37,51
IG3	106,62	49,01	78,13	41,76
IG4	87,65	48,40	81,30	43,76
IG5	109,25	48,13	60,49	41,28
IG6	81,56	47,55	53,36	24,04

Os dados de campo obtidos no ano de 2010 foram comparados com as concentrações médias diárias simuladas, como apresentado nas figuras 20 e 21. O gráfico do ponto IG2 mostra a condição de contorno propagada, gerada pela relação vazão-concentração estimada.

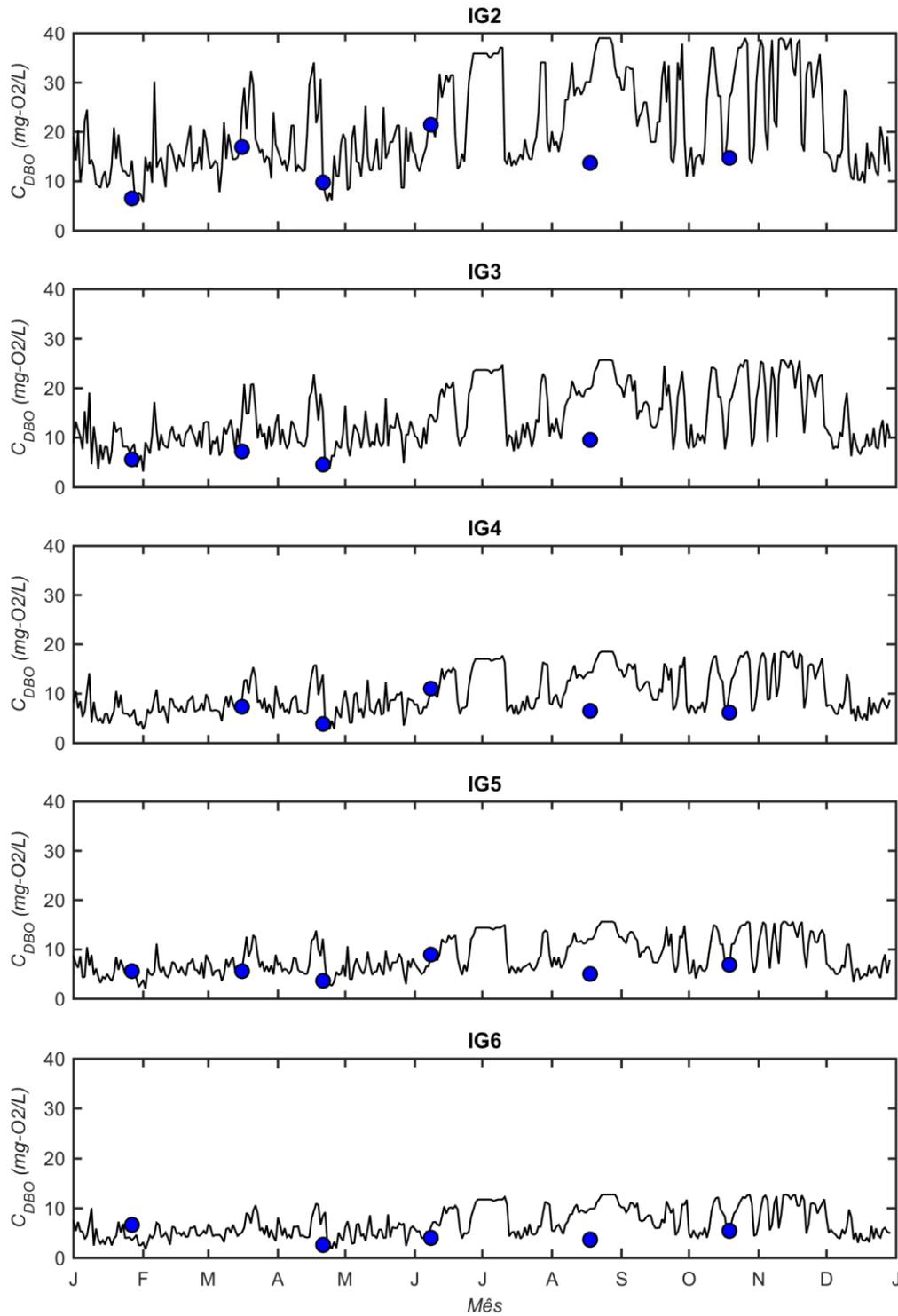


FIGURA 20 – Concentrações médias diárias simuladas (linha contínua) e medições (pontos) de DBO no ano de 2010

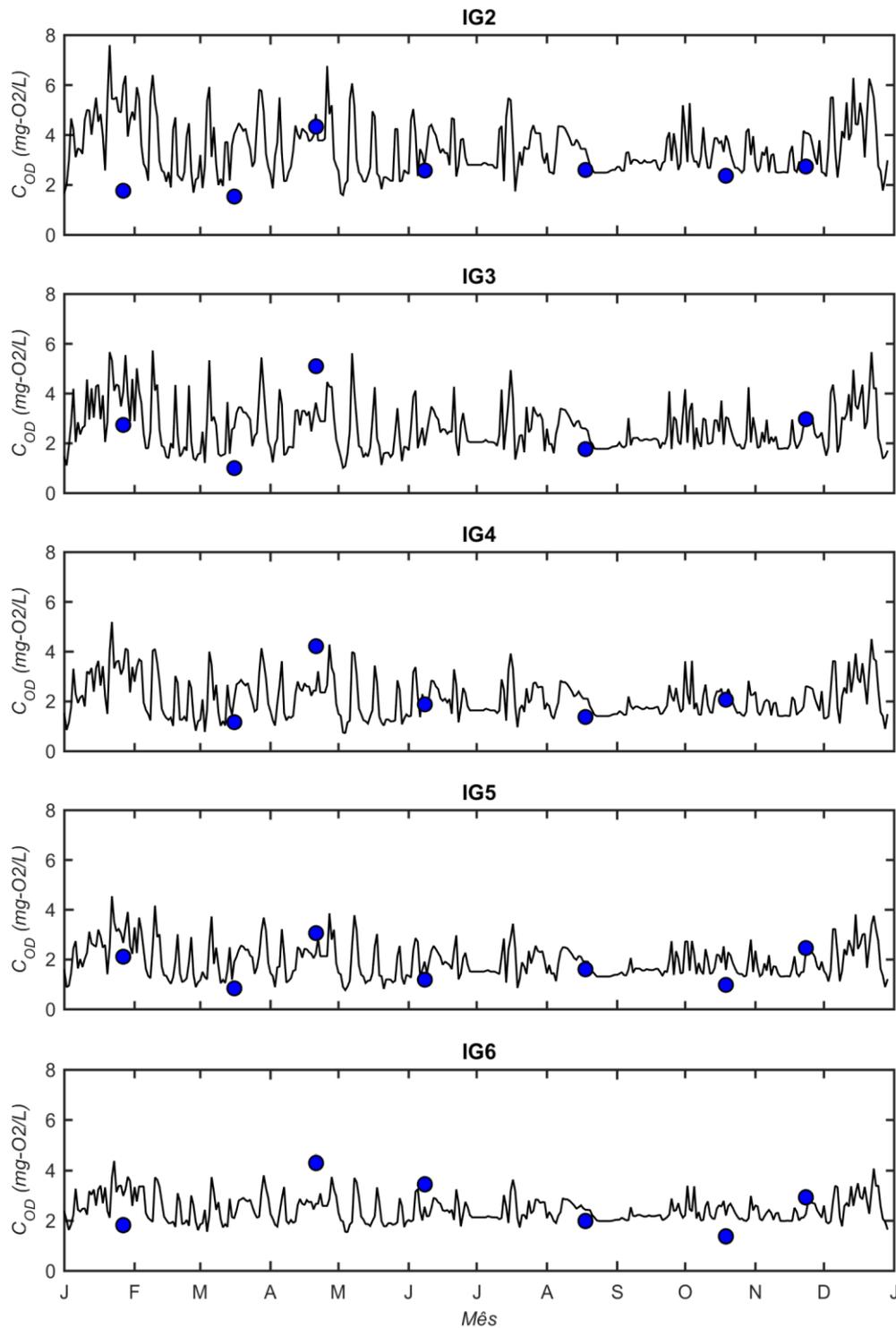


FIGURA 21 – Concentrações médias diárias simuladas (linha contínua) e medições (pontos) de OD no ano de 2010

Para DBO, pode-se observar que os resultados do modelo ficam próximos dos dados medidos. Somente no mês de agosto há um dado que diverge substancialmente da simulação. A definição da condição de contorno de montante relaciona vazões a concentrações diretamente; como verificado na figura 8, nos meses de agosto a outubro ocorreu um período

de estiagem, e outras interferentes não representadas na condição de contorno (efeito da variação temporal dos lançamentos sobre a concentração, por exemplo), podem ter contribuído para esse resultado discordante.

Na simulação do oxigênio dissolvido, apesar de a mediana simulada ficar próxima da medida (como verificado na figura 19), vários pontos medidos ficam fora da linha de valores simulados. Segundo Jobson (1985), o oxigênio é o constituinte mais complexo a ser simulado em modelagem de qualidade de água, uma vez que sua distribuição é afetada por diversos processos químicos, físicos e biológicos (concentração de DBO, amonificação, nitrificação, reaeração, profundidade e velocidade do canal etc). Uma ligeira diferença nos cálculos desses processos pode contribuir para o desacordo entre valores medidos e simulados das concentrações de oxigênio (Mannina e Viviani, 2010).

4.5 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

A análise de sensibilidade realizada consistiu em variar os seguintes parâmetros para os modelos em regime permanente e não-permanente, mantendo as demais condições constantes: taxa de desoxigenação (K_d), coeficiente de reaeração (K_a), e demanda de oxigênio pelo sedimento (K_d). Esses são os parâmetros usualmente mais sensíveis em termos de calibração de modelos de qualidade de água, conforme descrito em Bäumlé (2005), Kondageski (2008) e Knapik (2009). Na tabela 18 são reunidos os valores dos coeficientes modificados nas análises.

Inicialmente foram testados diferentes coeficientes de desoxigenação para a simulação de DBO (K_d' - 50% menor e K_d'' - 50% maior que o K_d calibrado em cada ponto para permanente e não-permanente). Os resultados dessas simulações são apresentados na figura 22. As condições de contorno não são afetadas pela variação dos coeficientes de reação, o que explica a convergência nos pontos IG6 para o modelo permanente e no IG2 para o modelo não-permanente.

TABELA 18 – Valores dos coeficientes de reação usados na análise de sensibilidade

COEFICIENTES	IG2	IG3	IG4	IG5	IG6
K_d	0,70	0,70	0,30	0,20	0,20
K_d'	0,35	0,35	0,15	0,10	0,10
K_d''	1,05	1,05	0,45	0,30	0,30
K_4	1,50	1,50	1,00	0,50	0,50
K_4'	1,20	1,20	0,80	0,40	0,40
K_4''	1,80	1,80	1,20	0,60	0,60
K_4'''	3,00	3,00	2,00	1,00	1,00
<i>Regime permanente</i>					
K_a	2,79	1,67	1,19	0,80	1,24
K_a'	2,23	1,34	0,95	0,64	0,99
K_a''	3,35	2,00	1,43	0,96	1,49
K_a'''	5,58	3,34	2,38	1,60	2,48
<i>Regime não-permanente</i>					
K_a	0,35	0,35	0,40	0,45	0,60
K_a'	0,28	0,28	0,32	0,36	0,48
K_a''	0,42	0,42	0,48	0,54	0,72
K_a'''	0,70	0,70	0,80	0,90	1,20

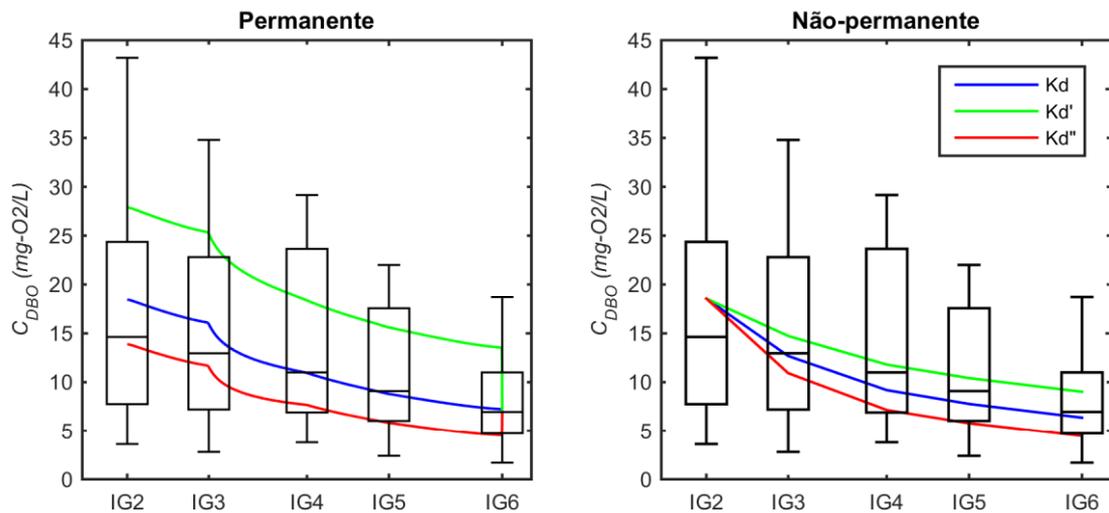


FIGURA 22 – Simulação de DBO com diferentes coeficientes de desoxigenação para regime permanente e não-permanente

Pode-se observar na figura 22 que, para baixos valores de K_d (linha verde), as soluções do modelo permanente são mais sensíveis do que as geradas no não-permanente. Para valores altos (linha vermelha) o comportamento entre os modelos é bastante similar. Portanto, há

indícios que os efeitos de reação, neste último caso, dominam os efeitos de transporte sobre a distribuição de massa no sistema.

Para OD foram testados diferentes coeficientes de reaeração (K_a' - 20% menor, K_a'' - 20% maior e K_a''' - dobro do K_a calibrado em cada ponto para permanente e não-permanente). Na figura 23 são indicadas as medianas simuladas em cada cenário e os *box plots* dos dados medidos.

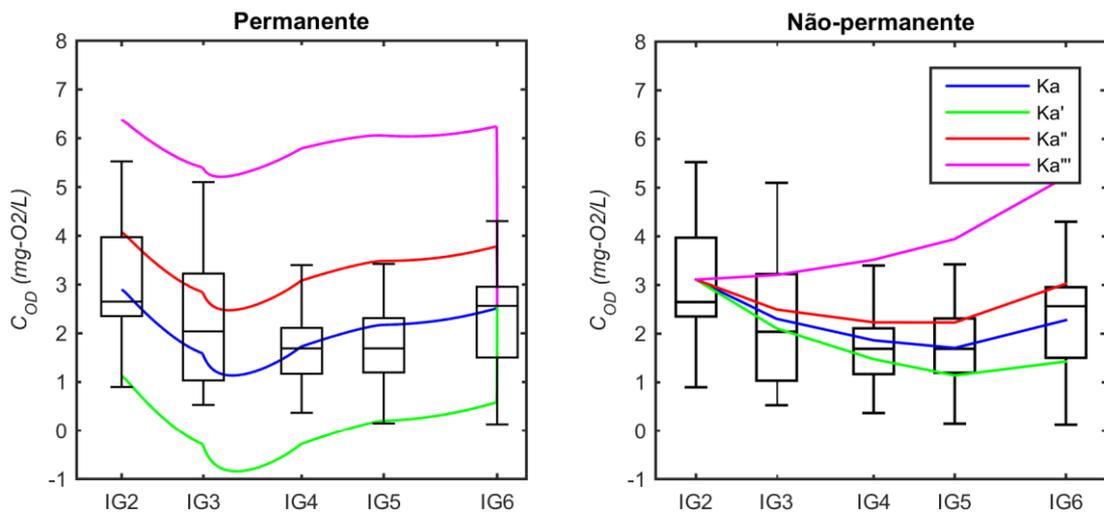


FIGURA 23 – Simulação de OD com diferentes coeficientes de reaeração para regime permanente e não-permanente

Os resultados indicam que o modelo em regime estacionário tende a ser mais sensível à variação do K_a que o não-permanente. No primeiro, a variação de 20% para mais e para menos faz com que os resultados fiquem fora da faixa de aceitação do ajuste (25 a 75 % de frequência dos dados) na maioria dos pontos.

Nas simulações com diferentes coeficientes de demanda de oxigênio pelo sedimento (K_4' - 20% menor; K_4'' - 20% maior e K_4''' - dobro do K_4 calibrado), apresentadas na figura 24, não se observou influência significativa sobre os resultados em termos médios. Isso indica que as concentrações de OD são pouco sensíveis a esse coeficiente. Esse comportamento foi também observado por Bäumle (2005) em simulação da qualidade do rio Palmital (pertencente a bacia do Alto Iguaçu) com o modelo QUAL2E.

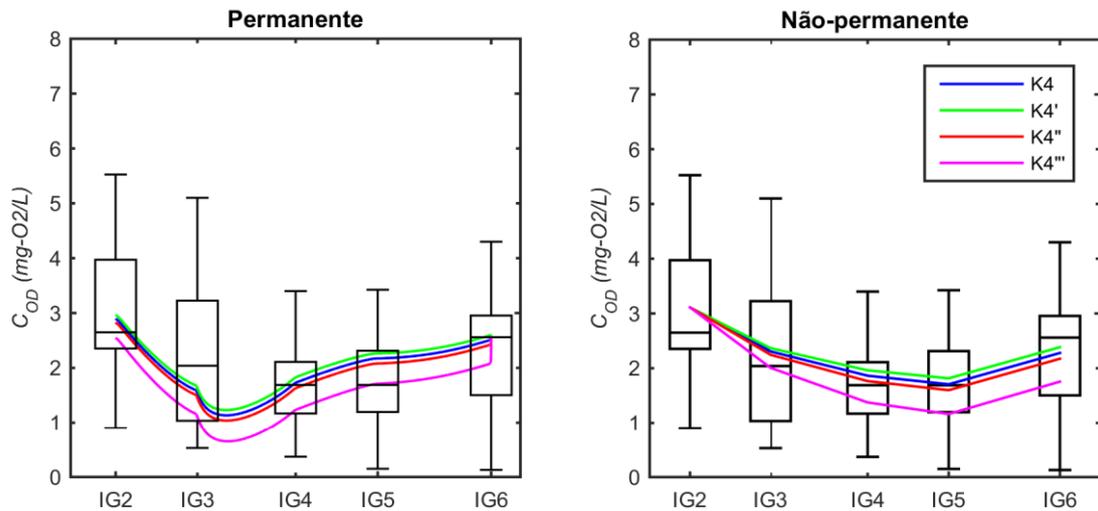


FIGURA 24 – Simulação de OD com diferentes coeficientes de demanda de oxigênio pelo sedimento para regime permanente e não-permanente

4.6 CURVA DE PERMANÊNCIA

A partir da curva de frequências para vazões simuladas (figura 12), foram obtidas as vazões correspondentes a 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 e 95% de permanência para os pontos IG2 a IG6. No modelo de qualidade de água em condição permanente, essas vazões foram usadas para cálculo das velocidades de escoamento correspondentes em cada ponto. A profundidade do escoamento, entretanto, não foi corrigida para essas novas vazões. Com exceção do coeficiente K_a no modelo para OD, que depende da velocidade em sua formulação, os demais parâmetros calibrados não foram alterados nessas análises. Na simulação do OD, as vazões a partir de 70% de permanência geraram alguns valores negativos, que não têm sentido físico. Nestes casos, adotou-se concentração igual a zero.

Associando a permanência das vazões à permanência de concentrações, e a partir das considerações descritas, foram geradas as curvas de permanência com o modelo em regime permanente, representadas nas figuras 25 e 26. A curva de permanência para estado não-permanente, representada pela linha contínua nas mesmas figuras, foi gerada através da disposição das concentrações simuladas em ordem decrescente e cálculo das frequências acumuladas.

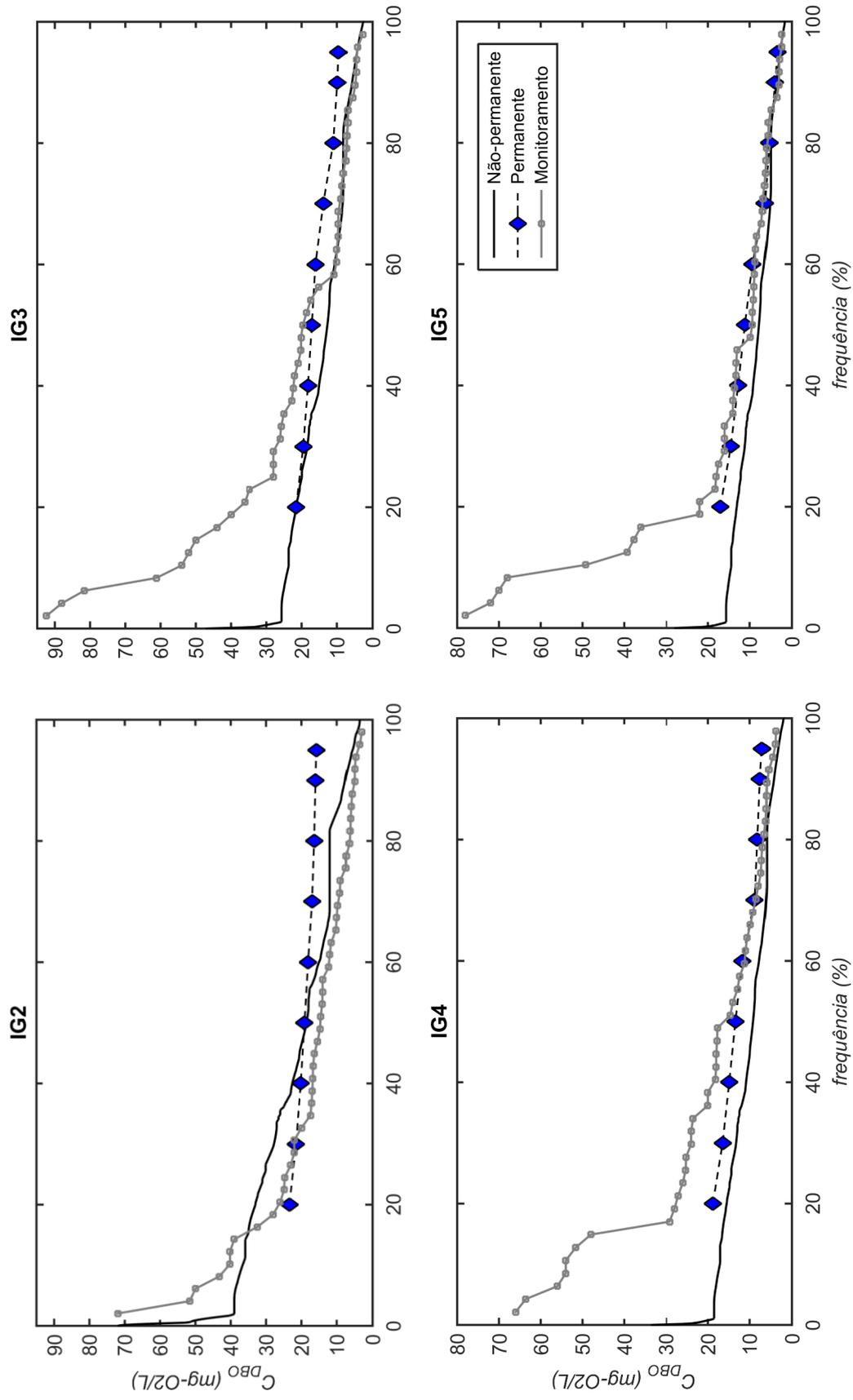


FIGURA 25 – Curvas de permanência para DBO geradas com dados de monitoramento e a partir da simulação em regime não-permanente e permanente

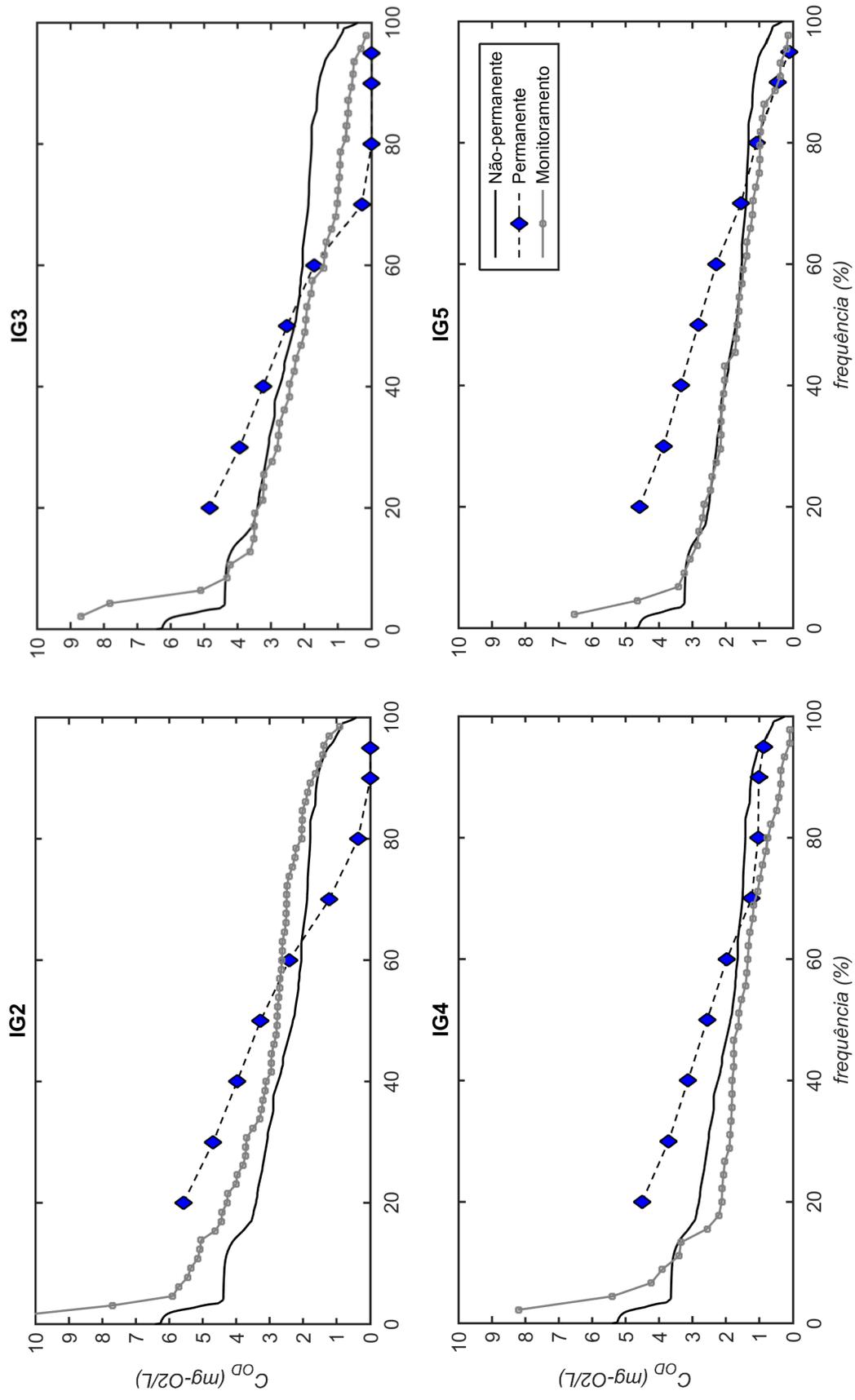


FIGURA 26 – Curvas de permanência para OD geradas com dados de monitoramento e a partir da simulação em regime não-permanente e permanente

Para DBO, no ponto IG5 principalmente, as concentrações do modelo permanente de 95 a 80% de permanência tendem a se aproximar dos valores gerados pelo modelo não-permanente, e divergirem para as frequências menores. Nessa região, onde a qualidade da água é ligeiramente melhor, os modelos permanente e não-permanente geraram resultados similares em condições de baixas vazões; ao atingir condições de maiores vazões (que correspondem também a concentrações mais altas), as discrepâncias entre os resultados aumentam.

Para trechos menos impactados, com melhor qualidade de água, e em condições de vazões mais baixas, as variações de concentração são mais lentas, confirmando o que foi apontado por Garcia e Tucci (2000). Ao aumentar a vazão, o papel da advecção torna-se mais importante sobre a distribuição de massa, além de ocorrer aumento da carga difusa que chega ao rio devido ao escoamento superficial. Por outro lado, no trecho de IG2 a IG3, onde a poluição por fontes externas é maior, a dinâmica do sistema faz com que essa relação concentração-vazão seja mais irregular.

A tabela 19 apresenta as diferenças absolutas de concentração para cada frequência geradas pelo modelo de regime permanente e pelo não-permanente. No ponto IG2 ocorreram as maiores discrepâncias (0,56 a 10,16 mgO₂/L), identificando os efeitos da definição das diferentes condições de contorno.

TABELA 19 – Diferença absoluta de concentração de DBO e OD entre as curvas de permanência geradas pelos modelos de regime permanente e não-permanente

FREQUÊNCIA (%)	DBO (mgO ₂ /L)				OD (mgO ₂ /L)			
	IG2	IG3	IG4	IG5	IG2	IG3	IG4	IG5
20	9,62	3,18	3,30	3,95	1,14	1,44	1,71	2,08
30	6,26	1,15	3,23	3,32	0,65	0,86	1,19	1,59
40	2,39	3,14	4,03	3,61	0,29	0,49	0,90	1,33
50	0,56	4,42	4,21	3,35	0,16	0,21	0,70	1,12
60	3,10	5,43	4,03	2,79	0,39	0,34	0,32	0,76
70	4,98	5,50	2,70	1,24	1,38	1,58	0,27	0,15
80	4,40	2,84	2,24	0,30	2,12	1,78	0,38	0,24
90	8,31	4,06	3,29	0,37	2,21	1,56	0,22	0,70
95	10,16	5,14	3,90	0,63	1,75	1,25	0,11	0,83

Para um dado valor de concentração, observa-se ainda que a maioria das frequências de ocorrência para o modelo permanente é maior que para o não-permanente. Como exemplo, a tabela 20 apresenta essa relação para uma concentração de 10 mgO₂/L de DBO e 2 mgO₂/L

de OD. Em alguns casos as diferenças são maiores que 20%, indicando que o modelo permanente tende a superestimar o tempo de permanência do rio em diferentes classes ao longo do ano.

TABELA 20 – Frequências de ocorrência para 10 mgO₂/L de DBO e 2 mgO₂/L de OD

PONTO	DBO		OD	
	PERMANENTE	NÃO-PERMANENTE	PERMANENTE	NÃO-PERMANENTE
IG3	89%	62%	56%	65 %
IG4	66%	44%	60%	46 %
IG5	56%	36%	64%	41 %

Dessa forma, a definição mais acurada da vazão pode ser importante para determinados propósitos. Diferenças de 1 mgO₂/L para OD, por exemplo, são suficientes para mudar a classificação de enquadramento do trecho estudado, e impactar decisões para planos de ação em bacias hidrográficas urbanizadas.

No que concerne às curvas de permanência geradas com dados de monitoramento apresentadas nas figuras 25 e 26 (aproximadamente 48 valores em cada seção), algumas questões relacionadas à variabilidade dos dados devem ser destacadas: em geral, as curvas obtidas com concentrações em campo ficaram mais próximas das curvas geradas com o modelo não-permanente, principalmente nos casos em que a vazão é menor para DBO; para o parâmetro OD, no ponto IG5 especialmente, é evidenciado que nove anos de monitoramento (entre 2005 e 2014) representaram as variações de concentração que ocorreram em apenas um ano (2010). Isto posto, confirma-se a necessidade de representação da variação temporal das condições de qualidade de água nas amostragens de campo, de modo a integrar monitoramento e modelagem.

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

“No model will provide a definitive solution to any problem because there is risk, in the form of uncertainty, associated with all methods of prediction. The ‘best’ models are those that have a solid basis of theoretical concepts, and have been confirmed by comparing actual measurements to predicted results.”

RIECKEN, S. **A compendium of water quality models**. Environmental Protection Department, 1995.

A implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos no tocante ao estabelecido pela Lei 9.433/97 é uma questão de caráter conceitual e técnico. Ela necessita ser explorada à luz de uma combinação entre dados consistente e ferramentas computacionais que permitam estabelecer condições para regras justas de gestão, com base em uma adequada reprodução da realidade física, química e biológica. As análises realizadas nesta pesquisa buscaram contribuir para a construção de ferramentas apropriadas para a interpretação dessas questões.

A combinação dos esquemas difusivo de Lax para o módulo hidráulico com o FTCS para o módulo de qualidade da água gerou resultados estáveis e consistentes ao longo da simulação estendida temporalmente. Adicionalmente, a associação de métodos explícitos mostrou-se eficiente na solução dos modelos hidrodinâmico e de qualidade de água, demonstrando a possibilidade de se obter soluções numéricas mais simples em problemas unidimensionais de qualidade da água.

Na modelagem da qualidade da água em estado permanente e não-permanente, observou-se que no segundo a sensibilidade dos resultados em relação aos coeficientes de reação é menor. Isso se deve principalmente ao efeito da variação temporal e espacial da advecção sobre a distribuição de poluentes; com a simulação hidrodinâmica, é possível inferir a real importância da velocidade do fluxo sobre a distribuição de massa no sistema. Isso foi verificado principalmente na definição do coeficiente de reaeração para as simulações e na análise de sensibilidade realizada. Na utilização do modelo em regime permanente, uma pequena variação na estimativa do K_a principalmente, faz com que os resultados possam diferir significativamente. Nesse caso, medidas de despoluição, por exemplo, podem ser mais onerosas do que o necessário, ou ter sua eficiência comprometida.

Diante disso, fica evidente a necessidade de se analisar com cautela aspectos relativos a calibração em modelos de qualidade da água. O uso de um determinado conjunto de valores pode, por exemplo, sobrepor os efeitos reais de transporte sobre a distribuição de poluentes em rios.

A simulação em condição não-permanente para demanda bioquímica de oxigênio gerou resultados mais próximos dos valores medidos do que para oxigênio dissolvido. Isso ocorreu principalmente porque a DBO leva em consideração apenas dois parâmetros de reação (K_d e K_s), enquanto a previsão de OD é afetada por diversos outros fatores, como temperatura e concentração de amônia e nitrito, representadas de modo simplificado nessa pesquisa. Apesar de terem sido obtidos resultados dentro da faixa de aceitação, recomenda-se que os efeitos desses outros interferentes sejam investigados em estudos futuros, uma vez que a previsão de OD usualmente é a razão primária para o desenvolvimento de modelos de qualidade de água.

Com as análises desenvolvidas foi possível avançar no entendimento acerca do comportamento hidrológico e da variação da concentração de DBO e OD ao longo do rio Iguaçu, mesmo a partir de poucos dados de campo. A relação entre os aspectos de quantidade e qualidade de água foi estabelecida através da curva de permanência, que tem aplicações potenciais na gestão de recursos hídricos, em particular sobre os instrumentos definidos na Lei 9.433/97.

A comparação do comportamento das curvas de permanência utilizando a abordagem da modelagem em estado permanente e não-permanente foi significativa o suficiente para destacar o impacto de um melhor detalhamento temporal da base de dados de qualidade da água, quando se compara com a forma atual de monitoramento e modelagem do ponto de vista computacional.

Os estudos desenvolvidos no rio Iguaçu têm sido baseados em dados gerados por cerca de quatro a seis amostragens por ano. Os resultados obtidos com o modelo não-permanente nesta pesquisa ofereceram indicativos que tais dados, entretanto, não contemplam as reais amplitudes de concentração e vazão, chamando atenção à necessidade de revisão dos planos atuais de monitoramento.

Algumas questões a serem consideradas no desenvolvimento desta pesquisa, e que estimulam a continuidade de estudos do problema hidrodinâmico e de qualidade de água são listadas a seguir:

- Não foram analisados os efeitos da variação temporal dos lançamentos no rio. Com isso, as mudanças de entrada de carga difusa (escoamento superficial) e pontual

(afluentes) no canal principal devido a variações meteorológicas (precipitação, temperatura), por exemplo, não foram consideradas. A oscilação diurna de lançamento das ETEs também não foi avaliada. Considerando-se que a base do problema não-permanente é estudar a variação temporal, essas hipóteses representam uma limitação conceitual do modelo desenvolvido.

- As cargas difusas e pontuais, para fins de simulação, não foram diferenciadas; essas contribuições também foram consideradas distribuídas uniformemente entre os pontos de monitoramento.
- As condições de contorno e inicial foram aproximadas. Criou-se um critério, relacionando vazão e concentração, para obter uma série temporal. Há incertezas em relação ao erro cometido nas interpolações, uma vez que as escalas não são compatíveis (considerou-se que as medições correspondam a médias diárias), e a relação entre essas variáveis é irregular. Para o período de um ano, tal aproximação gerou resultados satisfatórios; porém, a simulação de um período mais curto (horas, por exemplo) pode levar a interpretações equivocadas. Nesse caso, os efeitos da variação diurna das contribuições externas, por exemplo, devem ser representados pela condição de contorno.
- A calibração por tentativa e erro não é o procedimento mais eficiente, assim como a comparação apenas da mediana dos dados; medidas estatísticas e procedimentos para calibração automática (para os coeficientes de reação e de rugosidade de Manning) inferem mais confiabilidade ao ajuste; a análise de sensibilidade também poderia ser aprimorada deste modo.
- Análise de sensibilidade – diversos estudos têm avaliado a sensibilidade dos parâmetros de reação em relação aos resultados de concentração, porém essa análise ainda é pouco realizada para abordagem não-permanente. Os resultados obtidos nessa pesquisa indicam que uma análise mais aprofundada nesse sentido é importante.
- Coeficiente de dispersão longitudinal constante – recomenda-se uma reavaliação desse parâmetro, uma vez que sua variação espacial e temporal tem implicações sobre os valores simulados; nesse caso seria necessário reavaliar também o intervalo de tempo de simulação, de modo a atender às condições de estabilidade do método FTCS.
- Temperatura e concentrações de nitrogênio constantes – séries de dados temporais e espaciais, ou mesmo simulações desses parâmetros, podem aumentar a qualidade dos resultados da simulação de oxigênio dissolvido.

A maioria dessas questões envolve a necessidade de dados de monitoramento, principalmente séries temporais consistentes, que contemplem variações diurnas e sazonais. O uso de equipamentos automáticos para medição e coleta de amostras de água com base na mudança de variação de nível do canal, como proposto por Braga (2013), seria uma alternativa para obtenção dessas informações.

REFERÊNCIAS

AKBARI, G.; FIROOZI, B. Implicit and Explicit Numerical Solution of Saint-Venant's Equations for Simulating Flood Wave in Natural Rivers. **5th National Congress on Civil Engineering**. Mashhad, Iran, 2010.

ALDRIGHETTI, E. **Computational Hydraulic Techniques for the Saint Venant Equations in Arbitrarily Shaped Geometry**. Università Degli atudi di trento, 2007.

ALMEIDA, C. C.; FERNANDES, C.V.S.; KNAPIK, H. G.; SIECIECHOWICZ, M. S. F. Análise comparativa e estatística entre carga e concentração no monitoramento da qualidade da água em rios urbanos. **XX Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos**, 2013.

ALSHAWABKEH, A.; ADRIAN, D. Analytical water quality model for a sinusoidally varying BOD discharge concentration. **Water Research**, v. 31, n. 5, p. 1207–1215, 1997.

ANJOS, G. DOS; MANGIAVACCHI, N.; PONTES, J.; SOARES, C. Simulação numérica das equações de Saint-Venant utilizando o método dos elementos finitos. **Simpósio de Pós Graduação em Engenharia Mecânica**. p.1–12, 2006.

ARCEMENT, G. J.; SCHNEIDER, V. R. **Guide for selecting Manning's roughness coefficients for natural channels and flood plains**. United States Geological Survey Water-supply, 1984.

ATAIE-ASHTIANI, B.; LOCKINGTON, D. A.; VOLKER, R. E. Numerical correction for finite-difference solution of the advection-dispersion equation with reaction. **Journal Of Contaminant Hydrology**, v. 7722, n. 23, p. 149–156, 1996.

ATKINSON, B. J. F.; MEMBER, A.; GUPTA, S. K.; DEPINTO, J. V.; RUMER, R. R. Linking hydrodynamic and water quality models with different scales. **Journal of Environmental Engineering**, p. 399–408, 1998.

ATKINSON, T.; DAVIS, P. Longitudinal dispersion in natural channels: Experimental results from the River Severn, UK. **Hydrology and Earth System Sciences Discussions**, v. 4, n. 3, p. 345–353, 2000.

ÁVILA, L. C. **Modelagem da qualidade da água utilizando coeficientes bibliográficos e experimentais - aplicação ao rio Vacacaí Mirim**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Universidade Federal de Santa Maria, 2014.

BÄUMLE, A. M. B. **Avaliação de benefícios econômicos da despoluição hídrica: efeitos de erros de calibração de modelos de qualidade da água**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2005.

BEK, M. A.; LOWNDES, I. S.; HARGREAVES, D. M. The application of a validated hydrodynamic model to improve the water management of an Egyptian shallow water coastal lake. **International Environmental Modelling and Software Society (IEMSs)**, 2010.

BIZZONI, M. **Análise e modelagem numérica da qualidade da água na região do Alto Iguaçu**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2000.

BOWIE, G. L., MILLS, W. B., PORCELLA, D. B. **Rates, constants, and kinetics formulations in surface water quality modeling**. 2. ed. California: Environmental Protection Agency, 1985.

BRAGA, S. M. **Uma nova abordagem para integração entre quantidade e qualidade da água para a avaliação da poluição difusa**. Tese (Doutorado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2013.

BRASIL. Lei Federal nº 9.433, de 8 de janeiro de 1997. **Diário Oficial da República Federativa do Brasil**, Brasília, DF, 8 jan. 1997.

BRITES, A. P. Z. **Enquadramento dos corpos de água através de metas progressivas: probabilidade de ocorrência e custos de despoluição hídrica**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade de São Paulo, 2010.

BROWN, L. C.; BARNWELL, T. O. **The enhanced stream water quality model QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: computer program documentation and user manual**. Athens: United States Environmental Protection Agency, 189 p, 1987.

CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling**. Boston: Mass: WCB/McGraw-Hill, 1997.

CHAUDHRY, M. **Applied Hydraulic Transients**. New York: Van nostrand reinhold company, 1979.

CHAUDHRY, M. H. **Open-Channel Flow**. New York: Springer, 2008.

CHOW, V. T. **Open-Channel Hydraulics**. McGraw-Hill Book Company, 1959.

COELHO, M. **Estratégia de monitoramento de qualidade da água para gestão recursos hídricos em bacias urbanas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2013.

COLLISCHONN, W.; TASSI, R. **Introduzindo Hidrologia**. IPH, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2008.

COX, B. A review of currently available in-stream water-quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in lowland rivers. **The Science of The Total Environment**, v. 314-316, n. 03, p. 335–377, 2003.

CUNGE, J. A.; HOLLY, F.; VERWEY, A. **Practical aspects of computational river hydraulics**. Pitman, 1980.

CUNHA, A. C.; CUNHA, H. F. A.; PINHEIRO, L. A. R. Modelagem e simulação do escoamento e dispersão sazonais de agentes passivos no rio Araguari AP: Cenários para o

AHE Ferreira Gomes-I-Amapá/Brasil. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 18, p. 67–85, 2013.

CUNHA, C. L. N.; FERREIRA, A. P. Modelagem matemática para avaliação dos efeitos de despejos orgânicos nas condições sanitárias de águas ambientais. **Cad. Saúde Pública**, v. 22, n. 8, p. 1715–1725, 2006.

CUNHA, D. G. F.; CALIJURI, M. C. Análise probabilística de ocorrência de incompatibilidade da qualidade da água com o enquadramento legal de sistemas aquáticos – estudo de caso do rio Pariquera-Açu (SP). **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 15, n. 4, p. 337–346, 2010.

CUNHA, D. G. F.; CALIJURI, M. C.; MENDIONDO, E. M. Integração entre curvas de permanência de quantidade e qualidade da água como uma ferramenta para a gestão eficiente dos recursos hídricos **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 17, n.4, p. 369–376, 2012.

CUNHA, D. G. F.; DODDS, W. K.; CALIJURI, M. C. Defining nutrient and biochemical oxygen demand baselines for tropical rivers and streams in São Paulo State (Brazil): A comparison between reference and impacted sites. **Environmental Management**, v. 48, p. 945–956, 2011a.

CUNHA, D. G. F.; *et al.* Trophic state evolution in a subtropical reservoir over 34 years in response to different management procedures. **Water Science and Technology**, v. 64, p. 2338–2344, 2011b.

DELPHI, M. Application of characteristics method for flood routing (case study: Karun river). **International Journal of Current Research**, v. 3, n. 11, p. 327–330, 2011.

DHAWAN, S.; KAPOOR, S.; KUMAR, S. Numerical method for advection diffusion equation using FEM and B-splines. **Journal of Computational Science**, v. 3, n. 5, p. 429–437, 2012.

DORTCH, M.; JOHNSON, B. Hydrodynamics for Water Quality Models. **Hydraulic Engineering Sessions at Water Forum**, Baltimore: American society of civil engineers, 1992.

ESTABRAGH, A. R.; PERESHKAFTI, M. R. S.; JAVADI, A. A. Comparison between analytical and numerical methods in evaluating the pollution transport in porous media. **Geotechnical and Geological Engineering**, v. 31, n. 1, p. 93–101, 2012.

FABIANI, A. L. T.; OTA, J. J. Modelação da onda de ruptura de uma barragem pelo método dos volumes finitos em uma dimensão. **XX Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos**. p.1–8, 2013.

FAN, C.; WANG, W. S.; LIU, K. F. R.; YANG, T. M. Sensitivity analysis and water quality modeling of a tidal river using a modified streeter–phelps equation with HEC-RAS-calculated hydraulic characteristics. **Environmental Modeling & Assessment**, v. 17, n. 6, p. 639–651, 2012.

FAN, F. M.; COLLISCHONN, W.; RIGO, D. Modelo analítico de qualidade da água acoplado com Sistema de Informação Geográfica para simulação de lançamentos com duração variada. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 18, n. 4, p. 359–370, 2013.

FERNANDES, C. V. S. **INTEGRA 2: Bases Técnicas para a Integração de Instrumentos de Gestão de Recursos Hídricos - Estudo de Caso da Bacia do Alto Iguaçu e Bacia do Alto Tietê**. Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2013.

FISCHER, H. B., LIST, J. E., KOH, C. R., IMBERGER, J. **Mixing in Inland and Coastal Waters**. Academic Press, 1979.

FLECK, L.; TAVARES, M. H. F.; EYNG, E. Conceitos e importância da modelagem matemática de qualidade da água para gestão dos recursos hídricos. **Revista Ambiência**, v. 9, n. 3, p. 487–503, 2013.

FRANÇA, M. S. **Análise estatística multivariada dos dados de monitoramento de qualidade da água da bacia do Alto Iguaçu: uma ferramenta para a gestão de recursos hídricos**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2009.

FONSECA, A.; BOTELHO, C.; BOAVENTURA, R. A R.; VILAR, V. J. P. Integrated hydrological and water quality model for river management: a case study on Lena River. **The Science of the total environment**, v. 485-486, p. 474–89, 2014.

GAJDOS, A.; MANDELKERN, S. Comparative study of numerical schemes used for one-dimensional transport modelling. **2nd Int. PhD Symposium in Civil Engineering**, p. 1–8, Budapest, 1998.

GARCIA, R. L.; TUCCI, C. E. M. Simulação da qualidade da água em rios em regime não permanente: Rio dos Sinos. **Recursos Hídricos**, v. 21, n. 2, p. 17–26, 2000.

GASTALDINI, M. C. C.; OPPA, L. F. Análise de alternativas de enquadramento do rio Vacacaí Mirim utilizando modelo matemático de qualidade da água. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 16, n. 1, p. 17–27, 2011.

GONCALVES, V. D.; FERNANDES, C.V.S.; BEM, C. C.; KNAPIK, H. G.; MANNICH, M. Desafios da gestão de recursos hídricos: um olhar sobre o monitoramento ambiental de rios. **26º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental**, 2011.

GUNDUZ, O. **Coupled flow and contaminant transport modeling**. Dissertation - Georgia Institute of technology, 2004.

HASHEMI, M. R.; ABEDINI, M. J.; MALEKZADEH, P. A differential quadrature analysis of unsteady open channel flow. **Applied Mathematical Modelling**, v. 31, n. 8, p. 1594–1608, 2007.

HASSAN, A.; TANAKA, N.; TAMAI, N. Distributed water balance model in watershed coupling with river dynamic flow routing method. **16th IAHR-APD congress and 3rd symposium of IAHR-ISHS**. Nanjing, 2008.

HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows**. Wiley, 1991.

HSU, M. H.; KUO, A. Y.; KUO, J.; LIU, W. Procedure to calibrate and verify numerical models of estuarine hydrodynamics. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 125, n. 2, 1999.

HWANG, Y.-H. A characteristic particle method for the Saint Venant equations. **Computers & Fluids**, v. 76, p. 58–72, 2013.

JACCON, G.; CUDO, K. J. **Curva Chave: Análise e Traçado**. Brasília: DNAEE, 1989.

JEPPSON, R. **Open Channel Flow: Numerical Methods and Computer Applications**. CRC Press, 2011.

JOBSON, H. E. Simulating unsteady transport of nitrogen , biochemical oxygen demand , and dissolved oxygen in the Chattahoochee River Downstream from Atlanta, Georgia. **United States Geological Survey**, 1985.

JUXIANG, J.; HAIXIAO, J.; CHANGGEN, L.; JIANHUA, T. Hydrodynamic and water quality models of river network and its application in the Beiyun River. **5th International Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering**, 2011.

KALITA, H. M.; SARMA, A. K. Efficiency and performances of finite difference schemes in the solution of Saint Venant's equation. **International Journal of Civil and Structural Engineering**, v. 2, n. 3, p. 950–958, 2012.

KASHEFIPOUR, S. M.; FALCONER, R. A. Longitudinal dispersion coefficients in natural channels. **Water Research**, v. 36, n. 6, p. 1596–1608, 2002.

KAVISKI, E. **Notas de aula da disciplina de Escoamento Não-permanente em Canais**, 2013.

KNAPIK, H. G.; FRANÇA, M. S.; MASINI, L. S.; *et al.* Análise crítica da calibração do modelo de qualidade de água QUAL2E – estudo de caso da bacia do Alto Iguaçu. **Revista Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 5, n. 2, p. 25–37, 2008.

KNAPIK, H. G. **Reflexões sobre monitoramento, modelagem e calibração na gestão de recursos hídricos: estudo de caso da qualidade da água da bacia do Alto Iguaçu**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2009.

KNAPIK, H. G. **Organic matter characterization and modeling in polluted rivers for water quality planning and management**. Tese (Doutorado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2014.

KONDAGESKI, J. H. **Calibração de modelo de qualidade de água para rio utilizando algoritmo genético**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2008.

LI, B.; WANG, S. Research on modeling for the pollutant dispersion of the middle and lower reaches of the Yellow River. **First International Conference on Information Science and Engineering**. p.5059–5064, 2009.

LI, G.; JACKSON, C. R. Simple, accurate, and efficient revisions to MacCormack and Saul'yev schemes: high Peclet numbers. **Applied Mathematics and Computation**, v. 186, n. 1, p. 610–622, 2007.

LIGGETT, J. A. Basic equations of unsteady flow. In: Mahmood, K.; V. Yevjevich (Eds.); **Unsteady Flow in Open Channels**. Fort Collins: water resources publications, 1975.

LIGGETT, J. A.; CUNGE, J. A. Numerical Methods of Solution of the Unsteady Flow Equations. In: K. Mahmood; V. Yevjevich (Eds.); **Unsteady Flow in Open Channels**. Fort Collins: water resources publications, 1975.

LINS, R. C.; *et al.* Integração de um modelo hidrológico a um SIG para avaliação da qualidade da água na bacia do Rio Doce. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 17, n. 4, p. 171–181, 2012.

LIU, L.; ASCE, M.; FU, X.; WANG, G. Parametric study of fate and transport model of *e. coli* in the nearshore region of Southern Lake Michigan. **Journal of Environmental Engineering**, n. 1, p. 1–11, 2014.

LOBEIRO, A. M. **Solução das equações de Saint Venant em uma e duas dimensões usando o método das características**. Tese (Doutorado em Ciências) - Universidade Federal do Paraná, 2012.

MANNINA, G.; VIVIANI, G. River water quality assessment: a hydrodynamic water quality model for propagation of pollutants. **Novatech**, 2010.

MARIN, M. C. F. C.; SCUISSIATO, C.; FERNANDES, C. S.; PORTO, M. F. A. Proposta preliminar de reenquadramento dos corpos de água em classes e avaliação do seu risco de não atendimento: estudo de caso da bacia do Alto Iguacu. **XVII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos**, p. 1–18, 2007.

MARTIN, J. L.; MCCUTCHEON, S. C. **Hydrodynamics and transport for water quality modeling**. Lewis Publishers, 1999.

MCCUTCHEON, S. C. **Water Quality Modeling: River Transport and Surface Exchange**. CRC Press, 1989.

MELCHING, C. S.; FLORES, H. E. Reaeration equations derived from u.s. geological survey database. **Journal of Environmental Engineering**, v. 125, p. 407–414, 1999.

MENDOZA, A. P.; VALDEZ, A. R. L.; ARCEO, C. P. Numerical solution of de St. Venant equations with controlled global boundaries between unsteady subcritical states. **International multiconference of engineers and computer scientists (IMECS)**, v. II, 2011. Hong Kong.

MEYBECK M.; HELMER, R. **Water quality assessments - a guide to use of biota, sediments and water in environmental monitoring**. 2ed., UNESCO, 1996.

NAHON, I. M. **Sistema de apoio à análise de outorga de lançamento de efluentes para a variável demanda bioquímica de oxigênio: estudo de caso da bacia do Alto Iguaçu**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2006.

NAJAFI, H. S. Solving one-dimensional advection-dispersion with reaction using some finite-difference methods. **The Mathematical Sciences**, v. 2, n. 53, p. 2611–2618, 2008.

NASH, J. E.; SUTCLIFFE, I. V. River flow forecasting through conceptual models part 1: A discussion of principles. **Journal of Hydrology**, v. 10, p. 282–290, 1970.

NOGUEIRA, V. P. Q. Qualidade da água em lagos e reservatórios. In: S. B. BRANCO (Ed.); **Hidrologia Ambiental**. São Paulo: Associação Brasileira de Recursos Hídricos, p. 185–210, 1991.

OGATA, A.; BANKS., R. B. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. **Geological survey professional paper 411- A**, 1961.

OLIVEIRA, P. T. S.; RODRIGUES, D. B. B.; SOBRINHO, T. A.; PANACHUKI, E. Integração de informações quali-quantitativas como ferramenta de gerenciamento de recursos hídricos. **Revista de Estudos Ambientais**, v. 13, n. 1, p. 18–27, 2011.

OLSEN, N. **Numerical modelling and hydraulics**. Department of Hydraulic and Environmental Engineering, Norwegian University of Science and Technology, 2007.

PAIVA, R. C. D. **Modelagem hidrológica e hidrodinâmica de grandes bacias . estudo de caso : bacia do rio Solimões**. Dissertação (Mestrado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental) - Universidade Federal do Rio Grande Do Sul, 2009.

PALMIERI, V. **Calibração do modelo QUAL2E para o Rio Corumbataí (SP)**. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2003.

PATOWARY, S.; SARMA, A. K. Hydrodynamic flood routing considering piedmont zone. **International Journal of Civil and Structural engineering**, v. 3, p.464–474, 2013.

PENG, S. H. 1D and 2D numerical modeling for solving dam-break flow problems using finite volume method. **Journal of Applied Mathematics**, v. 2012, p. 1–14, 2012.

PEREIRA, D.; SANTOS, I.; FILL, H. D. Sistema de ajuste e extrapolação de curva de descarga - Stevens. **XV Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos**. p.1–12, 2003.

PEREIRA, P. S.; VEIGA, B. V.; DZIEDZIC, M. Avaliação da influência do fósforo e do nitrogênio no processo de eutrofização de grandes reservatórios estudo de caso: usina hidrelétrica Foz do Areia. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 18, p. 43–52, 2013.

PORTO, M. F. A.; FERNANDES, C. V. S.; KNAPIK, H. G.; FRANÇA, M. S.; BRITES, A. P. Z.; MARIN, M. C. F. C.; MACHADO, F. W.; CHELLA, M. R.; SÁ, J. F.; MASINI, L.

Bacias críticas: bases técnicas para a definição de metas progressivas para seu Enquadramento e a Integração com os demais instrumentos de gestão. Universidade Federal do Paraná, FINEP/ CT-HIDRO, 2007.

PORTO, R. L.; FILHO, K. Z.; SILVA, R. M. **Medição de vazão e curva-chave.** Apostila do curso Hidrologia Aplicada, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2001.

PRZYBYSZ, L. C. B. A. **Gestão de recursos hídricos sob ótica do usuário – estudo de caso da bacia do Alto Iguaçu.** Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2007.

RAHIMPOUR, M.; TAVAKOLI, A. Multi-grid Beam and Warming scheme for the simulation of unsteady flow in an open channel. **Water SA**, v. 37, n. 2, p. 229–235, 2011.

RAZDAR, B.; MOHAMMADI, K.; PIROOZ, B. Determining the best water quality model for the rivers in north of Iran (Case study: Pasikhan River). **Comp. Meth. Civil Eng.**, v. 2, n. 1, p. 109–121, 2011.

ROCHA, D. **Proposta metodológica para integração dos instrumentos de gerenciamento de recursos hídricos.** Tese (Doutorado em Ciências em Engenharia Civil) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2007.

ROCHA, P. A. C.; PITOMBEIRA, E. Aplicação de método espectral em grade não-uniforme na avaliação de dispersão de poluentes no rio Cocó em Fortaleza-CE. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 18, n. 1, p. 53–65, 2013.

SCHNOOR, J. L.; SATO, C.; MCKECHNIE, D.; SAHOO, D. **Processes, coefficients, and models for simulating toxic organics and heavy metals in surface waters.** Athens, Georgia, 1987.

SHUKLA, V. P. Analytical solutions for unsteady transport dispersion of nonconservative pollutant with time-dependent periodic waste discharge concentration. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 128, n. 9, 2002.

SILVA, S. C.; RIBEIRO, M. M. R. Enquadramento dos corpos d'água e cobrança pelo uso da água na bacia do rio Pirapama - PE. **Engenharia Sanitaria e Ambiental**, v. 11, 2006.

SLINGERLAND, P. VAN. **An accurate and robust finite volume method for the advection diffusion equation.** Thesis (Master of science in applied mathematics) - Delft University of Technology, 2007.

SOUSA, M. M. DE. **Comparação entre ferramentas de modelagem unidimensional e quasi-bidimensional, permanente e não-permanente, em planejamento e projetos de engenharia hidráulica.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2010.

SOUZA, R. S. **Simulação hidrodinâmica da qualidade da água. estudo de caso: ajuste do modelo CE-QUAL-W2 à sub-bacia do Arroio Demétrio, bacia hidrográfica do rio Gravataí/RS.** Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal Do Rio Grande do Sul, 2006.

STEINSTRASSER, C. E. **Método difusivo de Lax aplicado na solução das equações de Saint Venant**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, 2005.

STEPIEN, I. On the numerical solution of the Saint-Venant equations. **Journal of Hydrology**, v. 67, p. 1–11, 1984.

STREETER, H. W.; PHELPS, E. B. **A study of the pollution and natural purification of the Ohio river III**. Washington: U.S. Department of Health, Education, & Welfare, 1925.

Superintendência dos Recursos Hídricos e Meio Ambiente (SUREHMA). Portaria SUREHMA nº 20 de 12 de maio de 1992. Bacia do rio Iguaçu. **Diário Oficial do Estado**. Curitiba, 20 mai. 1992.

SZYMKIEWICZ, R. **Numerical modelling in open channel hydraulics**. Springer, 2010.

TANNEHILL, J.; ANDERSON, D.; PLETCHER, R. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. 2 ed. Hemisphere Publishing Corporation, 1997.

THOMANN, R. V.; MUELLER, J. A. **Principles of Surface Water Quality Modeling and Control**. New York: Harper Collins Publishers, 1987.

TORRES-BEJARANO, F.; DENZER, R.; RAMÍREZ, H.; *et al.* Development and integration of a numerical water quality model with the geospatial application suite CIDs. **19th International Congress on Modelling and Simulation**. p.12–16, 2011. Perth, Australia.

TRYGGVASON, G. **The advection- diffusion equation finite difference approximations of the derivatives**. Lecture notes - Computational fluid dynamics, 2013.

TSAKIRIS, G.; ALEXAKIS, D. Water quality models: an overview. **European Water**, v. 37, p. 33–46, 2012.

TUCCI, C. E. M.; MORETTI, L. Steady and non-steady flow models for simulation of water quality in rivers. Effects of waste disposal on groundwater and surface water. **Proceedings of the exeter symposium**, IAHS, 1982.

VILLA, A. T.; FERNANDES, C. V. S.; AZEVEDO, J. C. Caracterização do carbono orgânico para avaliação ambiental da qualidade da água - estudo de caso do lago do Parque Barigui. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 13, p. 23–34, 2008.

VON SPERLING, M. **Introdução à Qualidade das Águas e ao Tratamento de Esgotos**. 3. ed. Minas Gerais: DESA/UFMG, 2006.

VON SPERLING, M. **Estudos e modelagem da qualidade da água de rios**. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2007.

WANG, Q.; LI, S.; JIA, P.; QI, C.; DING, F. A review of surface water quality models. **The Scientific World Journal**, 2013.

WANG, P. F. Dispersion resulting from aggregating hydrodynamic properties in water quality modeling. **International Journal of Engineering Science**, v. 39, n. 1, p. 95–112, 2001.

ZARMEHI, F.; TAVAKOLI, A.; RAHIMPOUR, M. On numerical stabilization in the solution of Saint-Venant equations using the finite element method. **Computers & Mathematics with Applications**, v. 62, n. 4, p. 1957–1968, 2011.

ZHANG, W.; ARHONDITSIS, G. B. Predicting the frequency of water quality standard violations using bayesian calibration of eutrophication models. **Journal of Great Lakes Research**, v. 34, p. 698–720, 2008.

ZHOU, N.; WESTRICH, B.; JIANG, S.; WANG, Y. A coupling simulation based on a hydrodynamics and water quality model of the Pearl River Delta, China. **Journal of Hydrology**, v. 396, n. 3-4, p. 267–276, 2011.

ZOU, R.; CARTER, S.; SHOEMAKER, L.; PARKER, A.; HENRY, T. Integrated hydrodynamic and water quality modeling system to support nutrient total maximum daily load development for Wissahickon Creek , Pennsylvania. **Journal of Environmental Engineering**, p. 555–566, 2006.

ANEXOS

A DEDUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT

A.1 Equação de continuidade

A dedução apresentada a seguir é baseada no texto apresentado por Sturm (2001), que faz uso do Teorema do Transporte de Reynolds.

A equação da continuidade é derivada utilizando um volume de controle de comprimento Δx e profundidade y , como apresentado na figura A1.

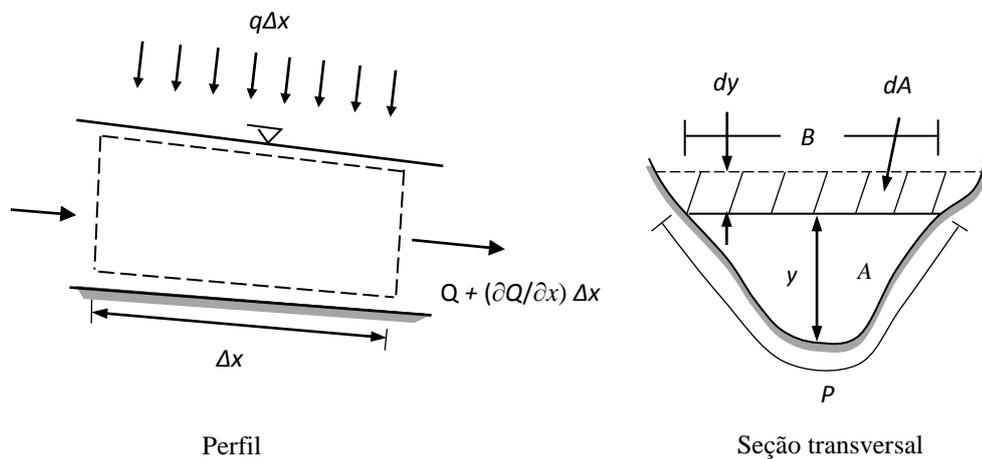


Figura A1 – Volume de controle em trecho de canal
 FONTE: Sturm (2001)

A conservação de massa considerando um fluido escoando através de um volume de controle é expressa por:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} \Delta x \Delta t - q \Delta x \Delta t = -\Delta x \frac{\partial A}{\partial t} \Delta t \quad (A1)$$

onde Q é a vazão do escoamento, q representa a contribuição lateral por unidade de comprimento do canal e A a área da seção transversal.

Dividindo a expressão (A1) por $\Delta x \Delta t$, a equação de continuidade pode ser escrita como:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (\text{A2})$$

Substituindo $dA = Bdy$, sendo B a largura do topo da superfície livre, tem-se:

$$B \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (\text{A3})$$

A vazão é dada por $Q = AU$, em que U é a velocidade média do escoamento na direção longitudinal. O termo $\partial Q/\partial x$ é reescrito como $A(\partial U/\partial x) + U(\partial A/\partial x)$ na equação (A3). Em canais naturais, enquanto B muda, a área A também pode variar com a profundidade y e com a distância x . Portanto, o termo $\partial A/\partial x$ deve ser avaliado da seguinte maneira:

$$\frac{\partial A}{\partial x} = \left. \frac{\partial A}{\partial x} \right|_y + B \frac{\partial y}{\partial x} \quad (\text{A4})$$

O termo $\left. \partial A/\partial x \right|_y$ representa a variação de A em relação a x , para um y constante. Para canais prismáticos, esse termo é nulo. Fazendo as substituições para $\partial Q/\partial x$ e $\partial A/\partial x$, a equação da continuidade é reduzida a:

$$B \frac{\partial y}{\partial t} + UB \frac{\partial y}{\partial x} + A \frac{\partial U}{\partial x} + U \left. \frac{\partial A}{\partial x} \right|_y = q \quad (\text{A5})$$

A.2 Equação de momento

A soma das forças externas agindo em um volume de controle é igual à variação da quantidade de movimento armazenada dentro volume de controle, mais a variação de quantidade de movimento através das superfícies de controle.

Na figura A2 são representadas as forças de gravidade, pressão e resistência atuantes sobre o volume de controle apresentado na figura A1.

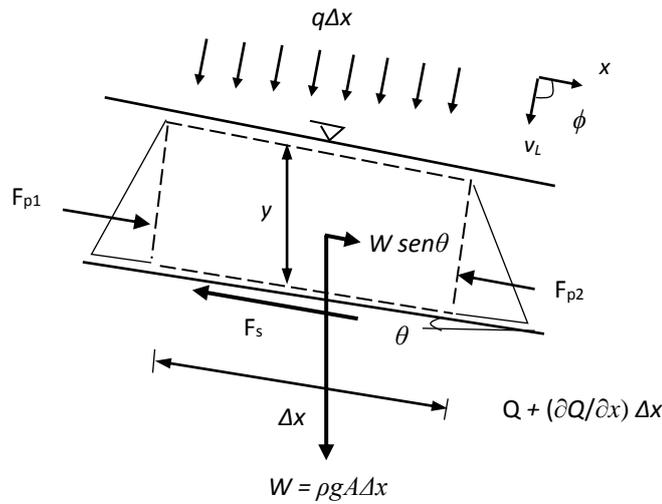


Figura A2 – Forças atuantes no volume de controle
 FONTE: Sturm (2001)

A equação da quantidade de movimento na direção longitudinal é expressa por:

$$F_p + F_g - F_s = \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_A \rho v_x dA \right] \Delta x + \frac{\partial}{\partial x} \left[\int_A \rho v_x^2 dA \right] \Delta x - \rho q v_L \Delta x \cos \phi \quad (A6)$$

onde v_x representa a velocidade do escoamento na direção x , v_L é a velocidade de entrada da contribuição lateral, ϕ é o ângulo de inclinação de v_L com a direção x , ρ é a densidade da água, F_p define a força de pressão, F_g a força devido à gravidade e F_s a força devido à resistência ao escoamento.

Considerando distribuição hidrostática de pressão (condição válida desde que a curvatura da superfície livre seja pequena) e canal com seção transversal regular, a força de pressão pode ser estimada por:

$$F_p = F_{p1} - F_{p2} = -\rho g A \frac{\partial y}{\partial x} \Delta x \quad (A7)$$

onde g é a aceleração da gravidade e y a profundidade.

A componente da força de gravidade na direção do fluxo é expressa por:

$$F_g = \rho g A \Delta x S_0 \quad (A8)$$

onde S_o representa a declividade do fundo do canal.

Considera-se que a força devido à resistência ao escoamento em regime não permanente não é significativamente diferente do que ocorre em condição estacionária (Kaviski, 2013). Logo:

$$F_s = \rho g A \Delta x S_f \quad (\text{A9})$$

onde S_f é a declividade da linha de energia.

O fluxo líquido de momento que sai do volume de controle é representado por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\int_A \rho v_x^2 dA \right] \Delta x = \frac{\partial}{\partial x} [\rho U^2 A] \Delta x \quad (\text{A10})$$

onde U define a velocidade média da seção transversal.

A variação temporal de momento dentro do volume de controle para fluido incompressível é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int_A \rho v_x dA \right] \Delta x = \rho \frac{\partial}{\partial t} [UA] \Delta x \quad (\text{A11})$$

Substituindo as equações (A7) a (A11) na expressão (A6) e rearranjando os termos:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A} \right) + gA \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right) = gA (S_o - S_f) + qv_L \cos \phi \quad (\text{A12})$$

Lembrando que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial t} &= \frac{\partial(UA)}{\partial t} = U \frac{\partial A}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial t} \\ \frac{\partial(Q^2/A)}{\partial x} &= \frac{\partial(UQ)}{\partial x} = Q \frac{\partial U}{\partial x} + U \frac{\partial Q}{\partial x} \\ \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} &= q \end{aligned} \quad (\text{A13})$$

A equação (A12) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + g \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{q \cos \phi (v_L - U)}{A} + g (S_0 - S_f) \quad (\text{A14})$$

A.3 Referências

KAVISKI, E. **Notas de aula da disciplina de escoamento Não-permanente em Canais**, 2013.

STURM, T. W. **Open Channel Hydraulics**. McGraw-Hill Book Company, 2001.

APÊNDICES

A SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICA PARA A EQUAÇÃO DE QUALIDADE DE ÁGUA

Em um teste preliminar, considerou-se um lançamento pontual com as seguintes características: $U = 0,01$ m/s; $D = 0,02$ m²/s; $L = 100$ m; $\Delta x = 1$ m; $\Delta t = 10$ s. As condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} C(x, 0) &= 0 & \rightarrow & x \geq 0 \\ C(0, t) &= 1 & \rightarrow & t > 0 \end{aligned} \quad (A1)$$

A solução analítica é a mesma do problema apresentado no Caso I, apresentado no item 4.3. Além do método FTCS, nesse exemplo foram testados os esquemas Lax-Friedrichs e *Upwind*:

Lax-Friedrichs

$$\frac{C_i^{k+1} - (C_{i+1}^k + C_{i-1}^k) / 2}{\Delta t} + U \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} - D \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{(\Delta x)^2} = 0 \quad (A2)$$

Upwind

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} + U \frac{C_i^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} - D \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{(\Delta x)^2} = 0 \quad (A3)$$

Os resultados, apresentados na figura A1, mostram que o método FTCS foi o que melhor reproduziu a solução analítica. O método Lax-Friedrichs mostrou-se instável, enquanto o *Upwind* produziu resultados discrepantes. Entretanto, as condições de estabilidade e acurácia desses métodos não foram avaliadas, e, portanto, não foi analisada a aplicabilidade ao problema estudado.

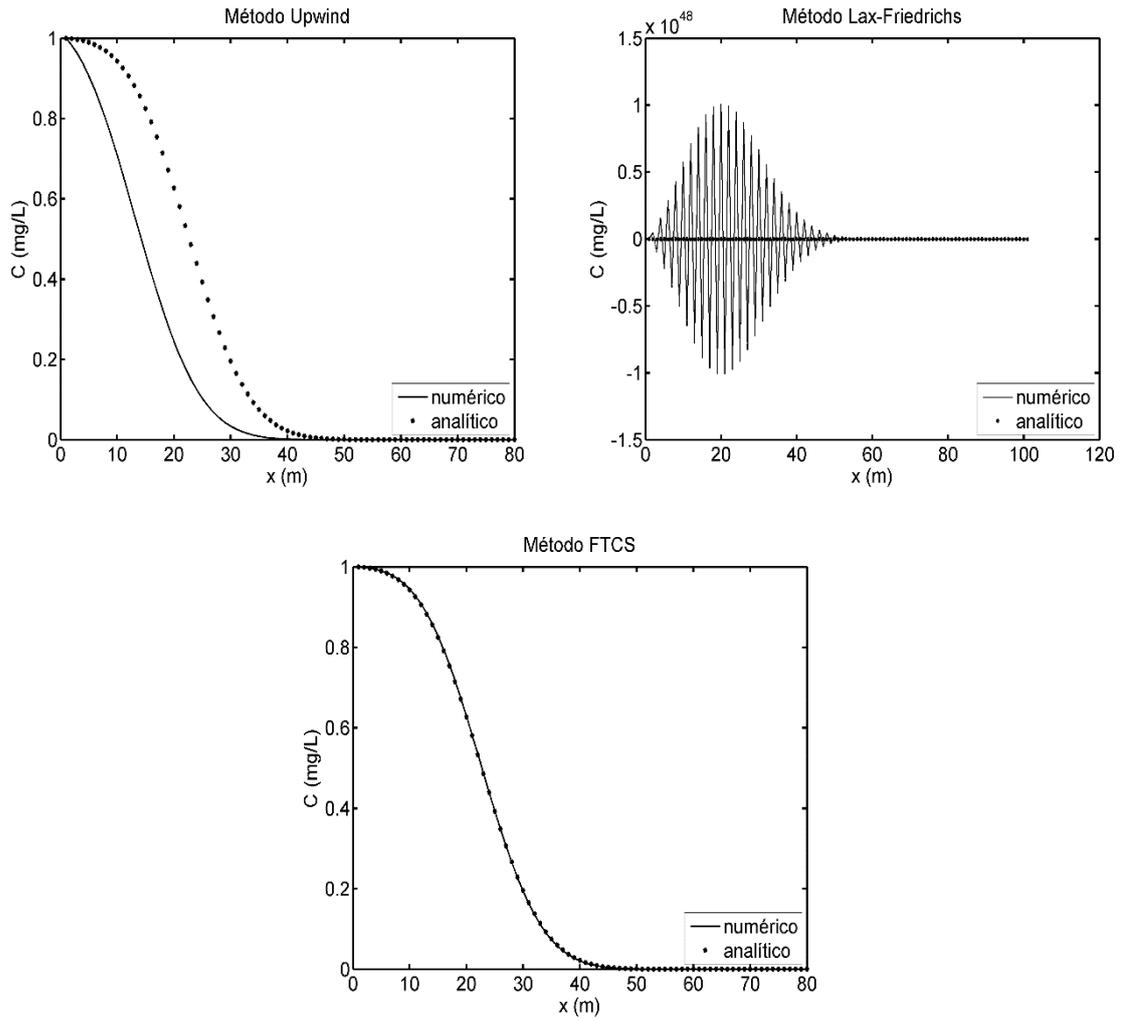


FIGURA A1 – Soluções analíticas e numéricas dos métodos *Upwind*, Lax-Friedrichs e FTCS

B VALIDAÇÃO DA SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT

Para verificação da solução numérica das equações de Saint-Venant foi reproduzido o problema da propagação de vazões no rio Iguazu, estudado por Steinstrasser (2005). A simulação foi realizada no trecho entre as cidades de Fluviópolis e União da Vitória (PR), considerando canal retangular, com largura variável, e declividade de fundo constante ($S_0 = 0,00009$ m/m).

Na figura B1 são apresentados os hidrogramas medidos em União da Vitória (seção de jusante) e simulados com o método difusivo de Lax para um evento de enchente ocorrido em 1990.

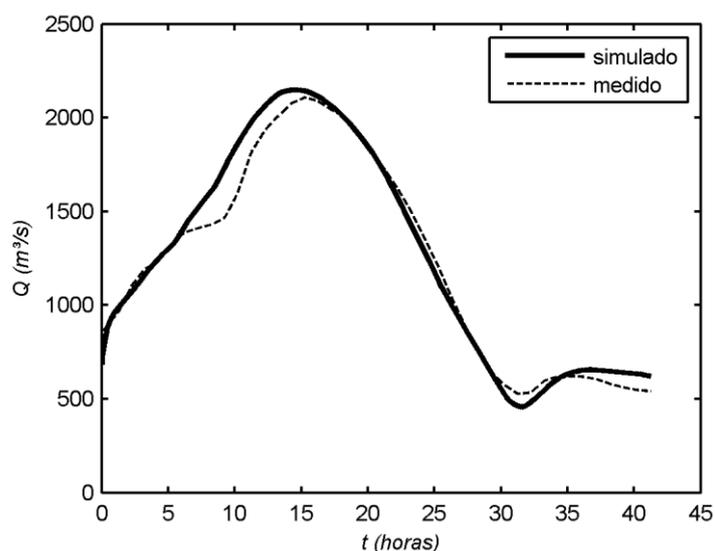


FIGURA B1 – Vazões medidas e simuladas com o método difusivo de Lax em União da Vitória

C CÓDIGOS COMPUTACIONAIS

C.1 Módulo hidrodinâmico

```

% =====
% Solução Saint Venant -- método difusivo de Lax
%                               Arquivo teste3.m
% =====
clear
clc
% DADOS GERAIS
dx=500;
dt=50;
L=83500;
t=0:dt:31449600;
x=0:dx:L;
J=length(x);
N=length(t);
alfa=0.1;
g=9.81;
% declividade do fundo
So(1:37)=0.00022;
So(37:81)=0.00023;
So(81:117)=0.00022;
So(117:J)=0.00016;
% hidrogramas - usado na condição de contorno/inicial
w=load('hidm.dat','-ascii');
Qam=w(:,1);
ta=0:86400:31449600;
Qaam=interp1(ta,Qam,t);
s=load('hidj.dat','-ascii');
Qaj=s(:,1);
Qaaj=interp1(ta,Qaj,t);
% Hidrogramas das seções intermediárias - usados na calibração
p=load('hidp3.dat','-ascii');
Qa3=p(:,1);
Qaa3=interp1(ta,Qa3,t);
r=load('hidp4.dat','-ascii');
Qa4=r(:,1);
Qaa4=interp1(ta,Qa4,t);
l=load('hidp5.dat','-ascii');
Qa5=l(:,1);
Qaa5=interp1(ta,Qa5,t);
% DADOS ST
ma=2.0;
mb=2.4;
mm(1:J)=interp1([0 L],[ma mb],[0:dx:L]);
b1(1:J)=interp1([0 18000 40000 58000 L],[16 19 40 41 45],[0:dx:L]);
n(1:J)=interp1([0 18000 40000 58000 L],[0.03 0.03 0.035 0.04
0.045],[0:dx:L]);
% eq curva chave seção 1
y1(1)=0.40738280207913+(Qaam(1)/17.6294084628535)^(1/1.55204329646179);
% eq curva chave seção J
y1(J)=6.326430243886660+(QaaJ(1)/0.000250614579311708)^(1/5.9061251185827);
% condições iniciais
y1(2:(J-1))=interp1([1 J],[y1(1) y1(J)],(2:(J-1)));

```

```

B1(1:J)=b1(1:J)+2*mm(1:J).*y1(1:J);
A1(1:J)=b1(1:J).*y1(1:J)+mm(1:J).*y1(1:J).^2;
v1(2:(J-1))=interp1([1 J],[v1(1) v1(J)],(2:(J-1)));
Rh1(1:J)=A1(1:J)./(b1(1:J)+2.*y1(1:J).*(1+mm(1:J).^2).^0.5);
Sf1(1:J)=((n(1:J).*v1(1:J)).^2)./(Rh1(1:J).^4/3);

% loop --> aplicação do método difusivo de Lax
for k=1:(N-1)
    for i=2:(J-1)
        % contribuição lateral
        q(1:37)=(Qaa3(k)-Qaam(k))*1.0/18000;
        q(37:81)=(Qaa4(k)-Qaa3(k))*1.0/22000;
        q(81:117)=(Qaa5(k)-Qaa4(k))*1.0/18000;
        q(117:J)=(QaaJ(k)-Qaa5(k))*1.0/25500;
        %
        yy=0.5*(y1(i-1)+y1(i+1));
        vv=0.5*(v1(i-1)+v1(i+1));
        SSf=0.5*(Sf1(i-1)+Sf1(i+1));
        AA=0.5*(A1(i-1)+A1(i+1));
        BB=0.5*(B1(i-1)+B1(i+1));
        y2(i)=alfa*y1(i)+(1-alfa)*yy-0.5*(dt/dx)*vv*(y1(i+1)-y1(i-1))-
0.5*vv*(dt/dx)*(A1(i+1)-A1(i-1))/BB-0.5*AA*(dt/dx)*(v1(i+1)-v1(i-
1))/BB+q(i)*dt/BB;
        v2(i)=alfa*v1(i)+(1-alfa)*vv-0.5*vv*(dt/dx)*(v1(i+1)-v1(i-1))-
0.5*g*(dt/dx)*(y1(i+1)-y1(i-1))+g*dt*(So(i)-SSf);
        b2(i)=b1(i);
        B2(i)=b2(i)+2*mm(i)*y2(i);
        A2(i)=b2(i)*y2(i)+mm(i)*y2(i)^2;
        Rh2(i)=A2(i)/(b2(i)+2*y2(i)*(1+mm(i)^2)^0.5);
        Sf2(i)=((n(i).*v2(i)).^2)/(Rh2(i)^4/3);
    end

    % Contorno de montante
    y2(1)=0.40738280207913+(Qaam(k+1)/17.6294084628535)^(1/1.55204329646179);
    b2(1)=b1(1);
    B2(1)=b2(1)+2*mm(1)*y2(1);
    A2(1)=b2(1)*y2(1)+mm(1)*y2(1)^2;
    v2(1)=Qaam(k+1)/A2(1);
    Rh2(1)=A2(1)/(b2(1)+2*y2(1)*(1+mm(1)^2)^0.5);
    Sf2(1)=((n(1).*v2(1)).^2)/(Rh2(1)^4/3);

    %Contorno de jusante
    y2(J)=y2(J-1);

    Qjc(k+1)=0.0002506145793117080000*(y2(J)+6.3264302438866600000000)^5.906125
1185827500000000; % Qjc = vazão em J calculada

    b2(J)=b1(J);
    B2(J)=b2(J)+2*mm(J)*y2(J);
    A2(J)=b2(J)*y2(J)+mm(J)*y2(J)^2;
    v2(J)=Qjc(k+1)/A2(J);
    Rh2(J)=A2(J)/(b2(J)+2*y2(J)*(1+mm(J)^2)^0.5);
    Sf2(J)=((n(J).*v2(J)).^2)/(Rh2(J)^4/3);

    %Redefinição de variáveis de entrada
    y1=y2;
    v1=v2;
    b1=b2;
    A1=A2;
    Rh1=Rh2;
    Sf1=Sf2;

```

```

Qj5(k+1)=0.0000877497324405823000*(y2(117)+5.8533590531588300000000)^6.4400
0052757079000000000;      %IG5

Qj4(k+1)=0.0002955681555553020000*(y2(81)+5.9083162600027600000000)^5.96593
7223346380000000000;      %IG4

Qj3(k+1)=0.0002163035988660540000*(y2(37)+5.2819975553872900000000)^6.16196
7214124750000000000;      %IG3

Qjc(1)=Qaa(1);
Qj3(1)=Qaa3(1);
Qj4(1)=Qaa4(1);
Qj5(1)=Qaa5(1);

% Teste da condição de Courant - estabilidade
C(k)=(dt*(abs(v2(i))+sqrt(g*A2(i)/B2(i))))/dx;
    if dt>=dx/(abs(v2(i))+sqrt(g*A2(i)/B2(i)))
        disp('erro')
    end
end

```

C.2 Módulo de qualidade em regime não-permanente – DBO

```

% =====
%      Solução modelo qualidade -- método FTCS
%      Arquivo explic.m
% =====

teste3;      % roda o modulo hidrodinamico

% carrega arquivos - concentracao e vazao medidas
aa=load('p2.dat','-ascii');
cc2=aa(:,1)/1000;      Qc2=aa(:,2);      % mg/L --> kg/m3
ca2=interp1(Qc2,cc2,Qaam(1));
bb=load('p3.dat','-ascii');
cc3=bb(:,1)/1000;      Qc3=bb(:,2);
ca3=interp1(Qc3,cc3,Qaa3(1));
dd=load('p4.dat','-ascii');
cc4=dd(:,1)/1000;      Qc4=dd(:,2);
ca4=interp1(Qc4,cc4,Qaa4(1));
ee=load('p5.dat','-ascii');
cc5=ee(:,1)/1000;      Qc5=ee(:,2);
ca5=interp1(Qc5,cc5,Qaa5(1));
ff=load('p6.dat','-ascii');
cc6=ff(:,1)/1000;      Qc6=ff(:,2);
ca6=interp1(Qc6,cc6,Qaa(1));

% cond inicial
c1(1:J)=interp1([0 18000 40000 58000 83500],[0.0146 0.0130 0.0110 0.0091
0.0070],0:500:83500);

% parâmetros - k1=Kd e k2=Ks
k1(1:J)=interp1([0 18175 40025 58275 83500],[0.7/86400 0.7/86400
0.3/86400 0.2/86400 0.2/86400],[0:500:L]);

```

```

k3(1:J)=interp1([0 18180 40020 58280 83500],[0.3/86400 0.3/86400 0.3/86400
0.15/86400 0.15/86400],[0:500:L]);
DD=20; % coef dispersao

c=zeros(N,J);

% cargas externas - 2010
cq(1:37)=-
((6409.96+320.40+1953.62+366.91+4726.35337)./(86400.*A1(1:37)*18175.41));
cq(37:81)=-
((241.01+974.97+572.22+228.74+7776.04+77.67+52.9+1158.0)./(86400.*A1(37:81)
*21855.12));
cq(81:117)=-((511.44+39.62+66.71)./(86400.*A1(81:117)*18256.29));
cq(117:J)=-((86.59+429.75)./(86400.*A1(117:J)*25443.28));

for k=1:(N-1)
    for i=2:(J-1)
        c2(i)=c1(i)-(dt/(2*dx))*v1(i)*(c1(i+1)-c1(i-
1)))+(DD*dt/A1(i))*(A1(i+1)-A1(i-1))/(2*dx)*(c1(i+1)-c1(i-
1))/(2*dx)+(DD*dt/(dx^2))*(c1(i+1)-2*c1(i)+c1(i-1))+(-k1(i)-
k3(i))*dt*(c1(i))-cq(i)*dt/A1(i);
    end

% contorno de montante/jusante
c2(1)=interp1(Qc2,cc2,Qaam(k+1),'PCHIP');
c2(J)=c2(J-1);

c1=c2; % redefinição variáveis

c(k+1,:)=c2*1000;
c(k,:)=c1*1000;

% estabilidade
if DD*dt/((dx)^2)>0.5 || v2(i)*dt/dx>1.0
    disp('erro')
end
end

```

C.3 Módulo de qualidade em regime não-permanente – OD

```

teste3; % roda o modulo hidrodinamico
explic; % roda o modulo de qualidade - DBO

aa=load('p2.dat','-ascii');
cc2=aa(:,1); % mg/L --> kg/m3
Qc2=aa(:,2);
ca2=interp1(Qc2,cc2,Qaam,'PCHIP');
bb=load('p3.dat','-ascii');
cc3=bb(:,1);
Qc3=bb(:,2);
ca3=interp1(Qc3,cc3,Qaa3,'PCHIP');
dd=load('p4.dat','-ascii');
cc4=dd(:,1);
Qc4=dd(:,2);
ca4=interp1(Qc4,cc4,Qaa4,'PCHIP');

```

```

ee=load('p5.dat','-ascii');
cc5=ee(:,1);
Qc5=ee(:,2);
ca5=interp1(Qc5,cc5,Qaa5,'PCHIP');
ff=load('p6.dat','-ascii');
cc6=ff(:,1);
Qc6=ff(:,2);
ca6=interp1(Qc6,cc6,Qaa6,'PCHIP');
dw=load('vaz1.dat','-ascii');
Qp=dw(:,1);

c1(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[median(cc2) median(cc3)
median(cc4) median(cc5) median(cc6)], [0:dx:L]);

k1(1:J)=interp1([0 18175 40025 58275 L],[0.7/86400 0.7/86400 0.3/86400
0.2/86400 0.2/86400], [0:dx:L]);
ka1(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[0.35/86400 0.35/86400 0.4/86400
0.45/86400 0.6/86400], [0:dx:L]);
Os=9.5294;
k4(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[1.5/86400 1.5/86400 1/86400
0.5/86400 0.5/86400], [0:dx:L]);
H=mean(y2(1:J));
a5=3.5;
a6=1.14;
b1=0.12/86400;
b2=1/86400;
DD=20;
N1(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[8.174366278 7.35 7.12 7.79
4.13], [0:dx:L]);
N2(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[0.215793034 0.15 0.22 0.19
0.19], [0:dx:L]);

c=zeros(N,J);

for k=1:(N-1)
    for i=2:(J-1)
        c2(i)=c1(i)-(dt/(2*dx))*v1(i)*(c1(i+1)-c1(i-1))+(DD*dt/A1(i))*(A1(i+1)-
A1(i-1))/(2*dx)*(c1(i+1)-c1(i-1))/(2*dx)+(DD*dt/(dx^2))*(c1(i+1)-
2*c1(i)+c1(i-1))+(ka1(i)*(9.5294-c1(i))-k1(i).*(dbo1(i))-k4(i)/H-
a5*b1.*(N1(i))-a6*b2.*(N2(i))))*dt;
    end
    % contorno de montante/jusante
    c2(1)=interp1(Qc2,cc2,Qp(k+1),'PCHIP');
    c2(J)=c2(J-1);

    c1=c2; % redefinição variáveis

    c(k+1,:)=c2;
    c(k,:)=c1;
    % estabilidade
    if DD*dt/((dx)^2)>0.5 || v2(i)*dt/dx>1.0
        disp('erro')
    end
end
end

```

C.4 Módulo de qualidade em regime permanente – DBO

```

dx=500;          L=83500;
x=0:dx:L;       J=length(x);

aa=load('p2.dat','-ascii');          cc2=aa(:,1);          % mg/L
bb=load('p3.dat','-ascii');          cc3=bb(:,1);
dd=load('p4.dat','-ascii');          cc4=dd(:,1);
ee=load('p5.dat','-ascii');          cc5=ee(:,1);
ff=load('p6.dat','-ascii');          cc6=ff(:,1);
gg=load('vel.dat','-ascii');         vv=gg(:,1);
hh=load('are.dat','-ascii');         AA=hh(:,1);

dx=25;
xb=0:dx:L;
J=length(xb);
A=interp1(x,AA,xb);
v=interp1(x,vv,xb);
A0=A(2);
A(J+1)=A(J);
D=20;

k1(1:J)=interp1([0 18175 40025 58275 L],[0.7/86400 0.7/86400 0.3/86400
0.2/86400 0.2/86400],[0:dx:L]);
k3(1:J)=interp1([0 18180 40020 58280 L],[0.3/86400 0.3/86400 0.3/86400
0.15/86400 0.15/86400],[0:dx:L]);

% COEFICIENTES DA MATRIZ
for i=2:(J-1)
    a(i)=(-v(i)/(2*dx)-D/(dx^2)+(D/(A(i)*2*dx))*((A(i+1)-A(i-1))/2*dx));
    b(i)=(2*D/(dx^2)+(k1(i)+k3(i)));
    c(i)=(v(i)/(2*dx)-D/(dx^2)-(D/(A(i)*2*dx))*((A(i+1)-A(i-1))/2*dx));
end

a(1)=0;
b(1)=(2*D)/(dx^2)+(k1(1)+k3(1));
c(1)=- (2*D)/(dx^2);
a(J)=(-v(J)/(2*dx)-D/(dx^2)+(D/(A(J)*2*dx))*((A(J+1)-A(J-1))/2*dx));
b(J)=(2*D/(dx^2)+(k1(i)+k3(i)));
c(J)=0;

% LADO DIREITO DA MATRIZ
f(1:728)=((6409.96+320.40+1953.62+366.91+4726.3534)./(86400.*A(1:728)*dx));
f(728:1602)=((241.01+974.97+572.22+228.74+7776.04+77.67+52.9+1158.0)./(8640
0.*A(728:1602)*dx)); % kg/m3/s
f(1602:2332)=((511.44+39.62+66.71)./(86400.*A(1602:2332)*dx));
f(2332:J)=((86.59+429.75)./(86400.*A(2332:J)*dx));

% TDMA
beta(1)=b(1);
gama(1)=f(1)/beta(1);

for i=2:(J-1)
    beta(i)=b(i)-a(i)*(c(i-1)/beta(i-1));
    gama(i)=(-a(i)*gama(i-1)+f(i))/beta(i);
end

```

```

y(J)=median(cc6);

for i=(J-1):-1:1
    y(i)=gama(i)-y(i+1)*c(i)/beta(i);           % mg/L
end

% convergencia
for i=2:(J-1)
    if abs(b(i))<=(abs(a(i))+abs(c(i)));
        disp('erro')
    end
end
end
if abs(b(1))<abs(c(1)) || abs(b(J))<abs(a(J));
    disp('erro1')
end
end

```

C.5 Módulo de qualidade em regime permanente – OD

```

clc; clear all; close all
dx=500;          L=83500;
x=0:dx:L;       J=length(x);

aa=load('p2.dat','-ascii');          cc2=aa(:,1);           % mg/L
bb=load('p3.dat','-ascii');          cc3=bb(:,1);
dd=load('p4.dat','-ascii');          cc4=dd(:,1);
ee=load('p5.dat','-ascii');          cc5=ee(:,1);
ff=load('p6.dat','-ascii');          cc6=ff(:,1);
gg=load('vel.dat','-ascii');          vv=gg(:,1);
hh=load('are.dat','-ascii');          AA=hh(:,1);
zz=load('prof.dat','-ascii');          prr=zz(:,1);
jj=load('dbo.dat','-ascii');          dbo=jj(:,1);
uu=load('np2.dat','-ascii');
dbo2=uu(:,1);
temp2=uu(:,4);
temp2k=temp2+273.15;
ln0=-139.3441+((1.575701*10^5)./temp2k)-
((6.642308*10^7)./(temp2k.^2))+((1.2438*10^10)./(temp2k.^3))-
((8.621949*10^11)./(temp2k.^4));
Os=mean(exp(ln0));

dx=25;
xb=0:dx:L;
J=length(xb);
pr=interp1(x,prr,xb);
A=interp1(x,AA,xb);
v=interp1(x,vv,xb);
Q=v.*A;

D=20;
k1(1:J)=interp1([0 18175 40025 58275 L],[0.7/86400 0.7/86400 0.3/86400
0.2/86400 0.2/86400],[0:dx:L]);
k2(1:J)=((3.95*(v(1:J).^0.5)./(pr(1:J).^1.53))/86400);
N1(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[8.174366278 7.35 7.12 7.79
4.13],[0:dx:L]);

```

```

N2(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[0.215793034 0.15 0.22 0.19
0.19],[0:dx:L]);

k4(1:J)=interp1([0 18200 40100 58400 L],[1.5/86400 1.5/86400 1/86400
0.5/86400 0.5/86400],[0:dx:L]);
H=mean(pr);
a5=3.5;
a6=1.14;
b1=0.12/86400;
b2=1/86400;
A0=A(2);
A(J+1)=A(J);

% COEFICIENTES DA MATRIZ
for i=2:(J-1)
    a(i)=(-v(i)/(2*dx)-D/(dx^2)+(D/(A(i)*2*dx))*((A(i+1)-A(i-1))/2*dx));
    b(i)=(2*D/(dx^2)+(k2(i)));
    c(i)=(v(i)/(2*dx)-D/(dx^2)-(D/(A(i)*2*dx))*((A(i+1)-A(i-1))/2*dx));
end
a(1)=0;
b(1)=(2*D/(dx^2)+(k2(i)));
c(1)=-(2*D)/(dx^2);
a(J)=(-v(J)/(2*dx)-D/(dx^2)+(D/(A(J)*2*dx))*((A(J+1)-A(J-1))/2*dx));
b(J)=(2*D/(dx^2)+(k2(i)));
c(J)=0;

% LADO DIREITO DA MATRIZ
f(1:728)=((k2(1:728))*Os-(k1(1:728)).*(dbo(1:728)-k4(1:728))/H-
a5*b1*N1(1:728)-a6*b2*N2(1:728)); % dx=25
f(728:1602)=((k2(728:1602))*Os-(k1(728:1602)).*dbo(728:1602)-
k4(728:1602))/H-a5*b1*N1(728:1602)-a6*b2*N2(728:1602));
f(1602:2332)=((k2(1602:2332))*Os-(k1(1602:2332)).*dbo(1602:2332)-
k4(1602:2332))/H-a5*b1*N1(1602:2332)-a6*b2*N2(1602:2332));
f(2332:J)=((k2(2332:J))*Os-(k1(2332:J)).*dbo(2332:J)-k4(2332:J))/H-
a5*b1*N1(2332:J)-a6*b2*N2(2332:J));

% TDMA
beta(1)=b(1);
gama(1)=f(1)/beta(1);
for i=2:(J-1)
    beta(i)=b(i)-a(i)*(c(i-1)/beta(i-1));
    gama(i)=(-a(i)*gama(i-1)+f(i))/beta(i);
end

y(J)=median(cc6);
for i=(J-1):-1:1
    y(i)=gama(i)-y(i+1)*c(i)/beta(i); % kg/m3
end

% convergencia
for i=2:(J-1)
    if abs(b(i))<=(abs(a(i))+abs(c(i)));
        disp('erro')
    end
end
if abs(b(1))<abs(c(1)) || abs(b(J))<abs(a(J));
    disp('erro1')
end

```

D SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA PARA JANEIRO E JULHO

Os valores simulados e observados de vazão nos cinco pontos de monitoramento para janeiro e julho de 2010 (calibração) e 2011 (verificação) são apresentados nas figuras D1 a D4, assim como os coeficientes de Nash-Sutcliffe. Esses meses indicam se o modelo representa de forma adequada um período chuvoso e outro de estiagem.

As condições de simulação (discretização espacial e temporal, coeficientes de Manning calibrados) foram as mesmas utilizadas para os anos de 2010 e 2011.

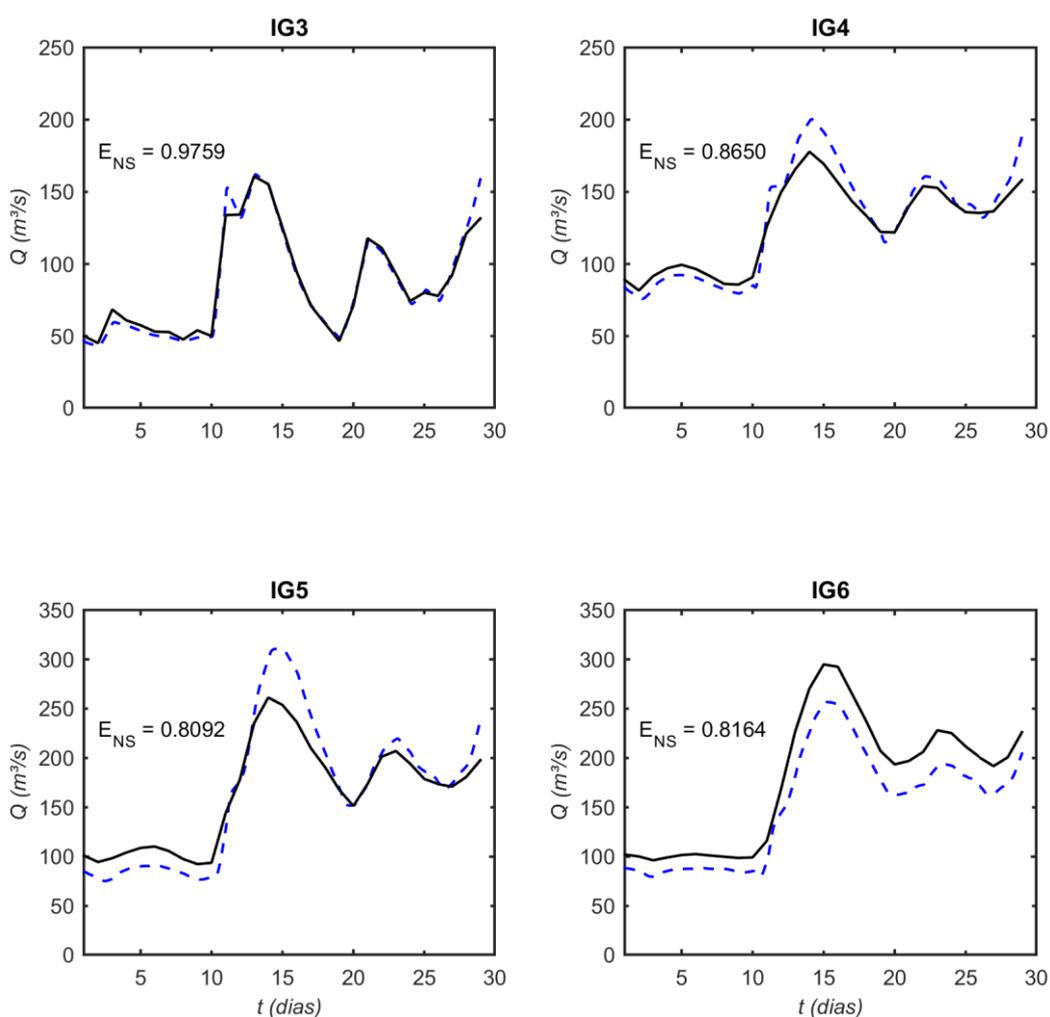


FIGURA D1 – Vazões simuladas (linha tracejada) e observadas (linha contínua) para janeiro de 2010

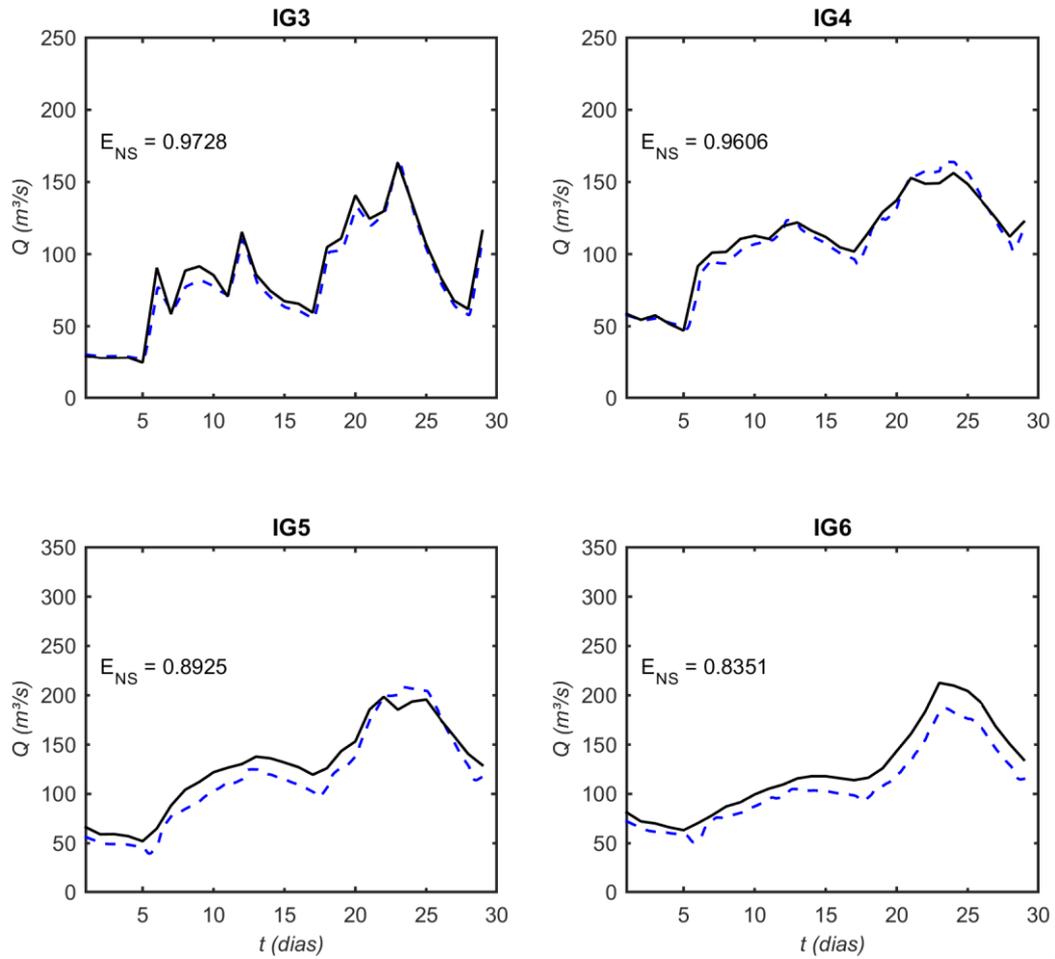


FIGURA D2 – Vazões simuladas (linha tracejada) e observadas (linha contínua) para janeiro de 2011

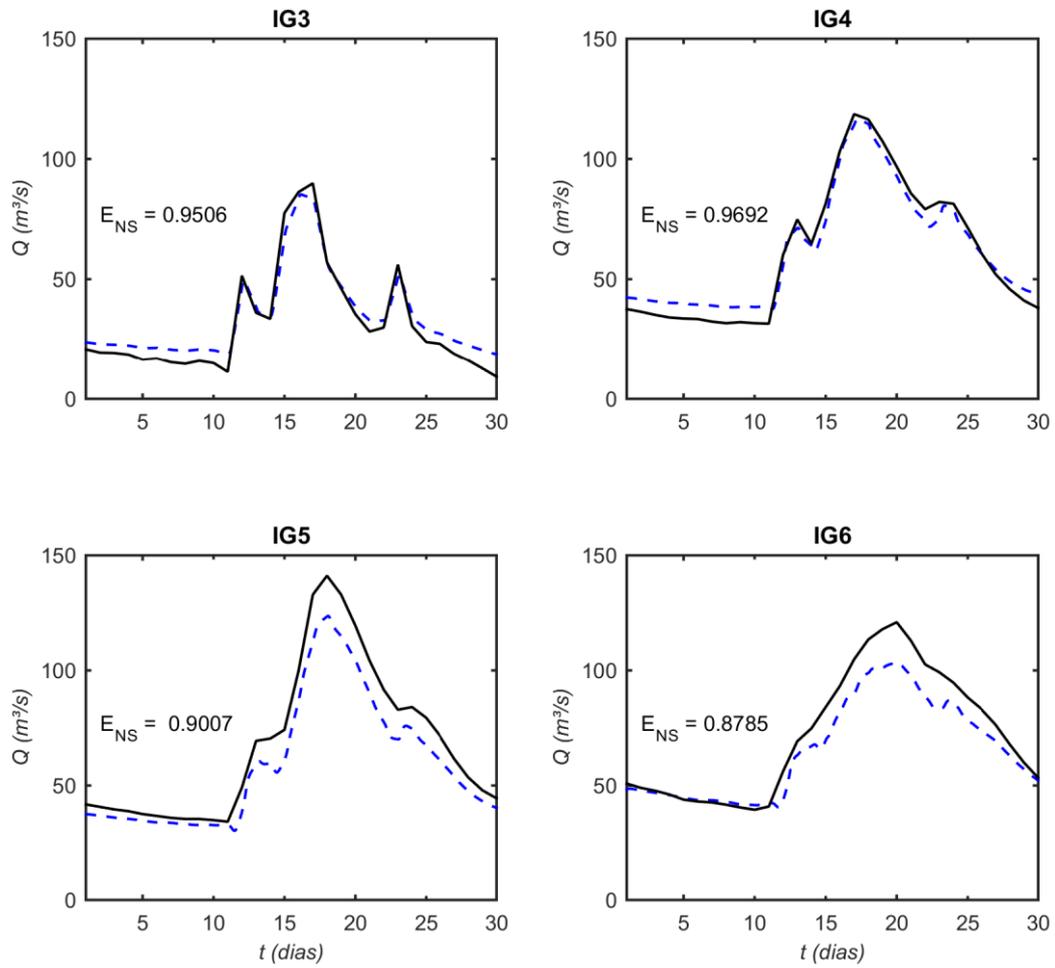


FIGURA D3 – Vazões simuladas (linha tracejada) e observadas (linha contínua) para julho de 2010

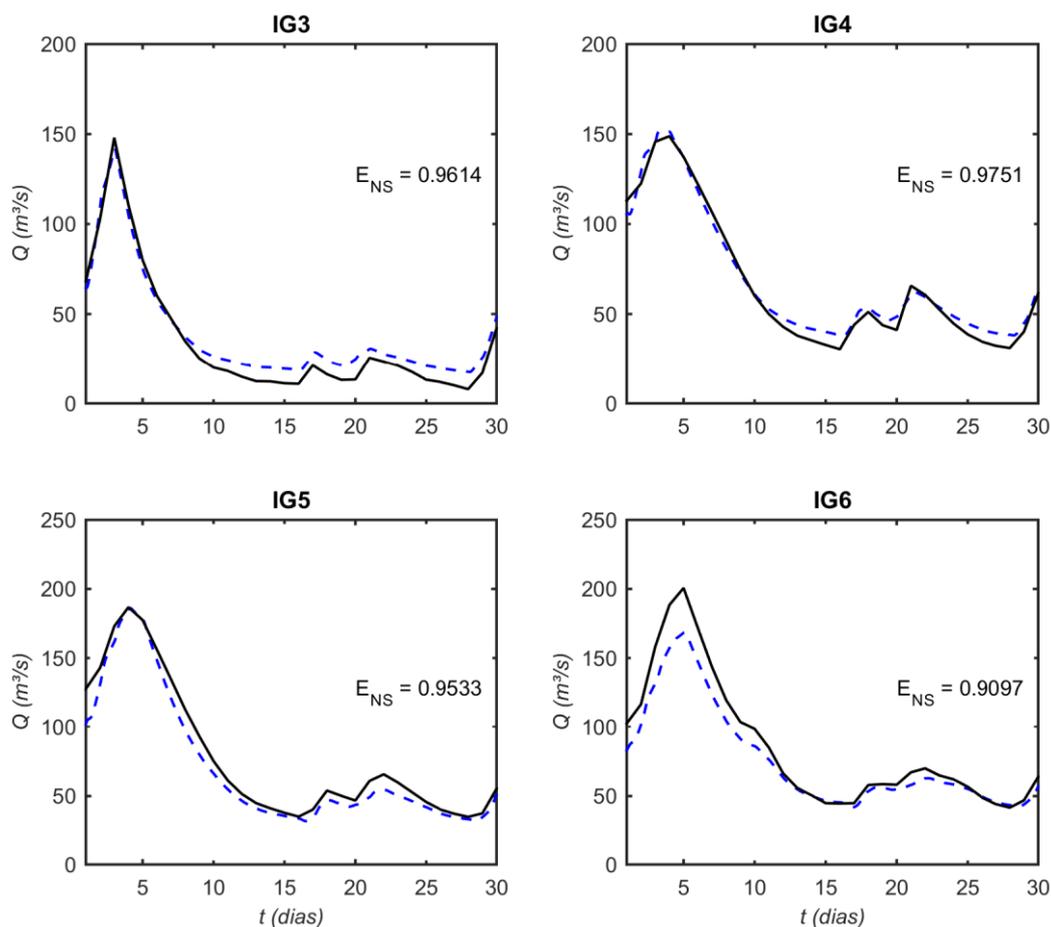


FIGURA D4 – Vazões simuladas (linha tracejada) e observadas (linha contínua) para julho de 2011

Os resultados mostram que o modelo simula relativamente bem as oscilações das vazões no período considerado, principalmente nos pontos IG3 e IG4, onde os formatos dos hidrogramas são mais próximos do hidrograma propagado. No ponto IG5 o ajuste perde um pouco a qualidade, principalmente devido à mudança de características no trecho a montante desse ponto (no trecho entre IG4 e IG5 o rio muda para ter meandros, o que interfere nas características hidráulicas do mesmo). Como o modelo propaga informações de IG2 para jusante, essas mudanças podem não ter sido bem representadas.

No ponto IG6 observa-se ainda que o hidrograma estimado tem valores menores que os observados. Nessa seção existem áreas de inundação, que não são representadas no modelo, e que podem ter contribuído para subestimar as vazões.

E SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA POR TRECHOS

No modelo hidrodinâmico foram conduzidas inicialmente simulações independentes nos trechos entre os pontos de monitoramento. Nesse caso, os dados utilizados (seções transversais, declividade do fundo e coeficiente de rugosidade) são os mesmos utilizados na simulação apresentada para 2010 e 2011, porém as condições iniciais e de contorno são alteradas (hidrogramas e curvas-chave). Os resultados para janeiro de 2011 são apresentados na figura E1, com $\Delta x = 500$ m e $\Delta t = 65$ s, bem como os coeficientes de Nash-Sutcliffe correspondentes (E_{NS}).

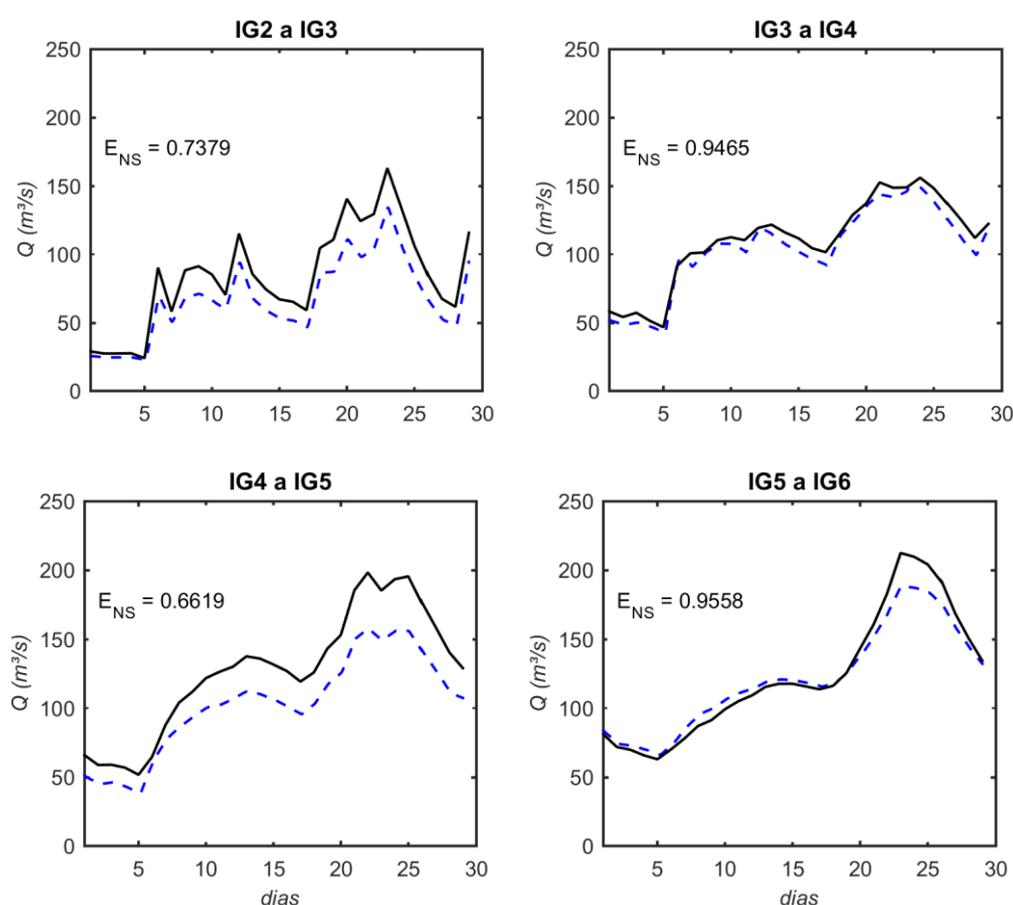


FIGURA E1 – Vazões simuladas (linha tracejada) e observadas (linha contínua) para janeiro de 2011 com as simulações por trechos

Os hidrogramas dos trechos IG2 a IG3 e IG4 a IG5 indicam principalmente a influência da calibração sobre os resultados, comparando com as simulações apresentadas na figura D2. É possível observar, ainda, que a simulação por trechos produziu resultados mais acurados para o ponto IG6 do que a simulação para o rio todo nesse mês. Isso ocorreu porque

o intervalo de comprimento do rio é menor e, portanto, menor a perda de informação entre a seção de montante (IG5 - condição de contorno) e a de jusante (IG6). Essas diferenças mostram que as condições iniciais e de contorno (curva chave principalmente) têm fundamental importância para a obtenção de resultados acurados.

F COEFICIENTE DE DISPERSÃO LONGITUDINAL

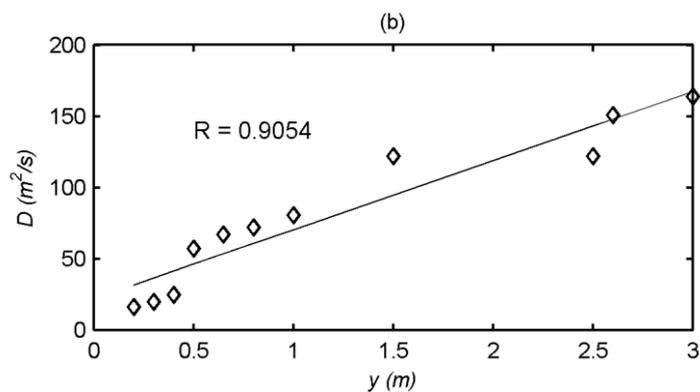
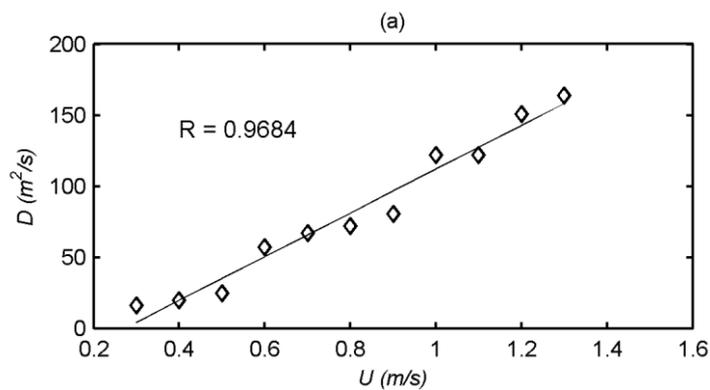
A partir da equação proposta por Fischer *et al.* (1979), foram realizados testes com diferentes larguras de topo (B), velocidades (U) e profundidades de escoamento (y). A expressão para determinação do coeficiente de dispersão longitudinal é dada por:

$$D = \frac{0,011U^2 B^2}{yu_*} \quad (\text{F1})$$

onde u_* representa a velocidade de cisalhamento, dada por:

$$u_* = (gyS_0)^{0,5} \quad (\text{F2})$$

Na figura F1 são apresentadas as relações entre as variáveis envolvidas na equação (F1) e os coeficientes de correlação de Pearson (R) calculados.



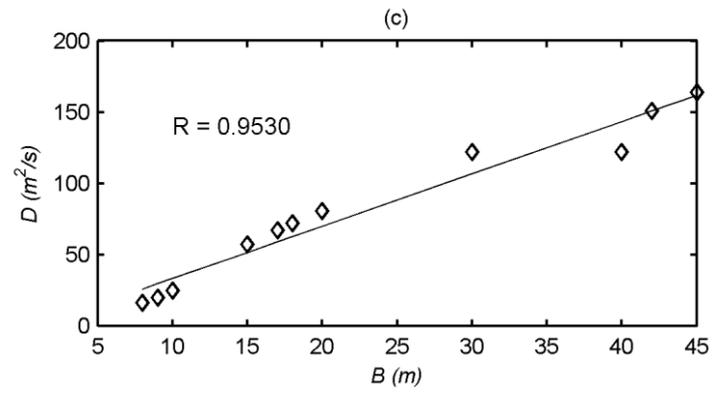


FIGURA F1 – Relação entre D e U (a), y (b) e B (c)

G SIMULAÇÃO EM REGIME PERMANENTE - TESTE PRELIMINAR

O problema proposto considera um canal prismático, com comprimento $L = 1$ m e velocidade constante ($U = 0,1$ m/s), sem reação ou fontes externas. O coeficiente de dispersão longitudinal é $0,01$ m²/s. As condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} C(x,0) &= 100x/L & 0 \leq x \leq L \\ C(0,t) &= 0 \\ C(L,t) &= 100 \end{aligned} \quad (G1)$$

A equação de transporte em regime permanente é dada por:

$$U \frac{dC}{dx} = D \frac{d^2C}{dx^2} \quad (G2)$$

cuja solução exata é:

$$C = 100 \left[\frac{\exp(xU/D) - 1}{\exp(xL/D) - 1} \right] \quad (G3)$$

Aplicou-se o método FTCS à equação de transporte em regime não-permanente, com $\Delta x = 0,02$ m e $\Delta t = 0,002$ s. As condições de estabilidade para esse caso são $\lambda = 0,05$ e $\gamma = 0,01$. Os resultados para um tempo de simulação de até 15 segundos, assim como a solução exata, são apresentados na figura G1. Observa-se que, para as condições adotadas, 15 segundos é o tempo que leva para que seja atingida uma condição estacionária de concentração.

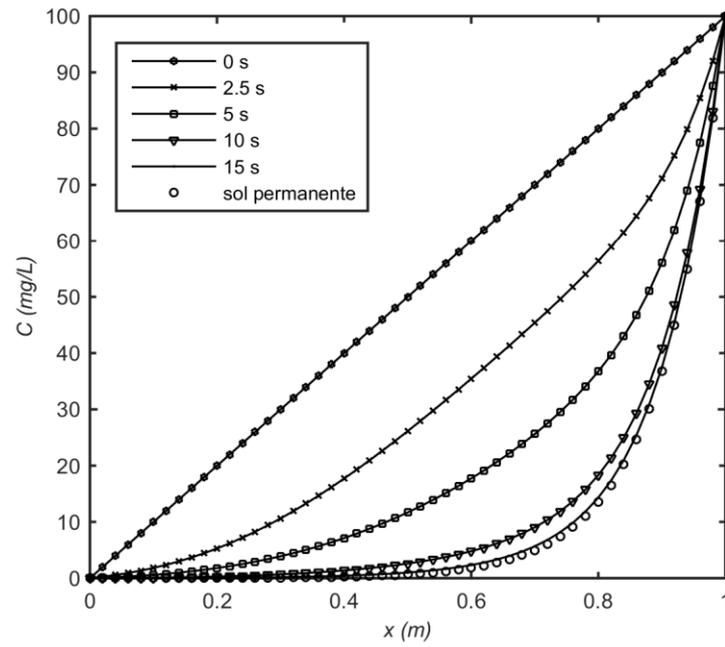


FIGURA G1 – Solução em regime permanente e não-permanente para $\Delta x = 0,02$ m e $\Delta t = 0,002$ s