

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
ESCOLA DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO *STRICTO SENSU*
EM ENGENHARIA AMBIENTAL E SANITÁRIA (PPGEAS)

**MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA
EM UM TRECHO DO RIO DOS BOIS,
GOIÁS.**

SAMARA SILVA SOARES

GOIÂNIA
2018

**TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR
VERSÕES ELETRÔNICAS DE TESES E DISSERTAÇÕES
NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG**

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei nº 9610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou *download*, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

1. Identificação do material bibliográfico: **Dissertação** **Tese**

2. Identificação da Tese ou Dissertação:

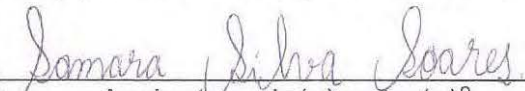
Nome completo do autor: Samara Silva Soares

Título do trabalho: Modelagem da qualidade da água em um trecho do rio dos Bois, Goiás.

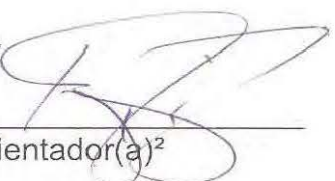
3. Informações de acesso ao documento:

Concorda com a liberação total do documento **SIM** **NÃO**¹

Havendo concordância com a disponibilização eletrônica, torna-se imprescindível o envio do(s) arquivo(s) em formato digital PDF da tese ou dissertação.


Assinatura do(a) autor(a)²

Ciente e de acordo:


Assinatura do(a) orientador(a)²

Data: 17 / 04 / 18

¹ Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. A extensão deste prazo suscita justificativa junto à coordenação do curso. Os dados do documento não serão disponibilizados durante o período de embargo.

Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro;
- Publicação da dissertação/tese em livro.

² A assinatura deve ser escaneada.

SAMARA SILVA SOARES

**MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA
EM UM TRECHO DO RIO DOS BOIS,
GOIÁS.**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Engenharia Ambiental e Sanitária da Universidade Federal de Goiás para obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental e Sanitária.

Área de Concentração: Sistemas de Abastecimento de Água e de Esgotamento Sanitário

Orientador: Paulo Sérgio Scalize

GOIÂNIA
2018

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Soares, Samara Silva

Modelagem da qualidade da água em um trecho do rio dos Bois, Goiás. [manuscrito] / Samara Silva Soares. - 2018.
106 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Sérgio Scalize.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Escola de Engenharia Civil e Ambiental (EECA), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental e Sanitária, Goiânia, 2018.

Bibliografia.

Inclui siglas, mapas, fotografias, abreviaturas, símbolos, gráfico, tabelas, lista de figuras, lista de tabelas.

1. Autodepuração. 2. Ecotoxicidade. 3. DBO. 4. OD. 5. Qual2kw. I. Scalize, Paulo Sérgio, orient. II. Título.


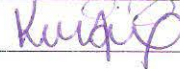

CDU 628.1

ATA DE DEFESA 002/2018

Mestrando (a): **SAMARA SILVA SOARES**

Título da Dissertação: Modelagem da qualidade da água em um trecho do Rio dos Bois, Goiás

2. Comissão Examinadora: (PROFESSORES DOUTORES)

Paulo Sérgio Scalize	Presidente/Orientador		APROVADA
Karla Alcione da Silva Cruvinel (EECA)	Exam. Externo		Aprovada
Humberto Carlos Ruggeri Júnior (EECA)	Suplent Exam. Externo		
Alexandre Kepler Soares (PPGEAS)	Examinador Interno		APROVADA
Klebber Teodomiro Martins Formiga	Suplent Exam. Interno		

3. Resultado:

A Banca Examinadora, em 01/03/2018, 14 horas, na EECA - UFG, após o exame da Defesa da Dissertação e arguição do candidato, decidiu:

- Pela aprovação do(a) candidato(a) por unanimidade;
 Pela aprovação do(a) candidato(a) por maioria;
 Pela reprovação do(a) candidato(a) por unanimidade;
 Pela reprovação do(a) candidato(a) por maioria.

Preencher após reformulação:

- O(A) aluno(a) apresentou as modificações sugeridas no prazo de 30 dias e a dissertação foi aprovada;
 O(A) aluno(a) não apresentou as modificações sugeridas pela banca.

Autenticação
Presidente da Comissão Examinadora

1º de março de 2018.

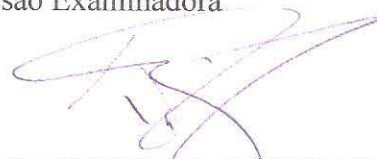

Prof. Dr. Paulo Sérgio Scalize
PPGEAS/EEC/UFG

Assinatura do candidato:


Samara Silva Soares

Autenticação após reformulação
Presidente da Comissão Examinadora

01/03/2018



*Dedico ao meu eterno
e amado avô Rodolfo
Justino da Silva.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço à Deus por tudo que superei nesse caminho, em que tive a oportunidade de aprender todos os dias, por me ajudar em todos os momentos e por sempre estar ao meu lado.

À minha mãe, pelo amor de cada dia, pelo incentivo e por nunca medir esforços para a minha formação.

Ao meu orientador Prof. Dr. Paulo Sérgio Scalize, que me acompanhou e acreditou que eu seria capaz de realizar esse trabalho. Agradeço também pela paciência, ensinamentos e por todas as ajudas dadas ao longo desse caminho.

Ao Prof. Joel Roberto Guimarães Vasco, por compartilhar os seus conhecimentos comigo, pela ótima ajuda e sugestão dada a esse trabalho.

Ao Prof. Dr. Eduardo Queija de Siqueira, por me apresentar o tema de pesquisa desse trabalho e ter dado os princípios dos seus ensinamentos.

Às minhas colegas Poliana e Daiane, por me auxiliarem nas coletas e nas análises laboratoriais e à Andreia e o Andrew que me acompanharam na jornada do Mestrado e aos demais professores e colegas que colaboraram com a pesquisa.

À UFG, pela ajuda financeira por meio da bolsa de Mestrado.

RESUMO

A modelagem da qualidade da água é uma importante ferramenta para a gestão dos recursos hídricos, uma vez que possibilita simular situações futuras do uso da água, definindo melhor a capacidade de assimilação do curso d'água por meio dos limites de lançamentos de fontes pontuais ou para extrações de determinadas vazões para subsidiar o licenciamento de atividades junto aos órgãos competentes. Dessa forma, o presente trabalho teve como principal objetivo obter um modelo para o oxigênio dissolvido (OD), demanda bioquímica de oxigênio (DBO), pH, temperatura, nitrogênio orgânico (Norg) e nitrogênio amoniacal (NH₄) através de simulações numéricas com o modelo QUAL2Kw e avaliar a qualidade da água através de análises físico-químicas e microbiológicas juntamente com ensaios de ecotoxicidade utilizando o estágio embrio-larval de zebrafish (*Danio rerio*) em um trecho do rio dos Bois – Goiás, para verificar as condições de qualidade da água do trecho de estudo frente às classes de qualidade da Resolução CONAMA 357/2005. Para tanto, os dados de monitoramento da qualidade da água e características hidráulicas do trecho estudado foram obtidos em quatro campanhas amostrais, em outubro e novembro de 2015 e janeiro e março de 2016, fornecendo assim, os dados de entrada para calibrar o modelo QUAL2Kw. Além disso, foram realizadas duas campanhas amostrais em fevereiro e setembro de 2017 para a realização dos ensaios de ecotoxicidade e dos parâmetros físico-químicos e microbiológicos, bem como as análises de metais traços. De forma geral, os resultados da calibração apresentaram um bom ajuste, principalmente para a variável de oxigênio dissolvido. A situação mais crítica ocorreu no mês de outubro de 2015, onde as concentrações de OD persistem abaixo de 5 mg/L por um longo trecho de extensão e a DBO e o NH₄ também apresentaram não conformidade em relação ao atendimento legal da Resolução CONAMA 357/05. Em todas as campanhas amostrais a DBO manteve-se acima de 5mg/L por no mínimo 5 km de extensão, estando em desacordo com a legislação por ultrapassar a distância da zona de mistura, situada em média à $1,5 \pm 0,5$ km do ponto de lançamento total de efluentes. Foram ainda realizadas análises de incerteza para o OD enfatizando o cenário crítico do mês de outubro de 2015, em que, apenas 9,4 % das simulações conduziram a um OD_{mín} maior que 5 mg/L e análises de sensibilidade pela Simulação Monte Carlo para o coeficiente de desoxigenação e reaeração, em cada campanha amostral, evidenciando a significância do coeficiente de reaeração na determinação das concentrações de OD. Quanto à qualidade e ecotoxicidade da água do trecho estudado em fevereiro e setembro de 2017, após o ponto de lançamento de efluentes, houve aumento nas concentrações de alguns parâmetros de qualidade da água e de alguns metais traços analisados como fósforo total, ferro, chumbo e cobre, e conseqüentemente maiores efeitos significativos no desenvolvimento de embriões de zebrafish. Dessa forma, o presente trabalho permitiu concluir que o modelo QUAL2Kw apresentou-se como uma boa ferramenta para simulação de lançamentos pontuais no rio dos Bois apresentado um bom ajuste no ato da calibração, com o valor de RMEQ médio de $0,808 \pm 0,005$ para todas as campanhas amostrais. A realização da análise de incerteza por simulação Monte Carlo demonstrou que é possível apresentar os resultados em forma probabilística, conhecendo o risco assumido que é desconsiderado pela abordagem determinística.

Palavras-chave: Autodepuração. Ecotoxicidade. DBO. OD. Qual2kw.

ABSTRACT

Water modeling is a great tool for water resources management, since it allows a simulation of future water sources, better defining the capacity of assimilation through the limits of source releases for extractions of certain fugacies to subsidize the licensing of service with the competent entities. Thus, the main objective of the present work was the model for dissolved oxygen (DO), biochemical oxygen demand (BOD), pH, temperature, organic nitrogen (Norg) and ammoniacal nitrogen (NH₄) through numerical simulations with the The QUAL2Kw e evaluates the quality of dry blood dry-larvae of zebrafish (*Danio rerio*) in a stretch of the Bois-Goiás river, to verify how the water quality conditions of the study stretch with the quality classes of the solution CONAMA 357/2005. "In order to do so, the quality monitoring data and the hydraulic nature of the study were obtained in four years, in October and November of 2015 and in January and March of 2016, thus, the input data for the QUAL2Kw model. the two campaigns were carried out in February and September 2017 to conduct the ecotoxicity tests and the physical-chemical and microbiological results as well as trace metal analysis. In general, the calibration parameters are adjustable, especially for a solution of The date is most recent in 2015, where OD accounts persist below 5 mg / L over a long stretch and the BOD and NH₄ also do not conform to the legal approach of CONAMA Resolution 357/05 In most of the series, BOD remained above 5 mg / L for at least 5 km in length, disagree with the legislation for exceeding the distance of the mixing zone, located on average at 1.5 ± 0.5 km from the point of 1 In the second half of 2015, uncertainty analyzes were performed for the OD, where only 9.4% of the simulations are more important than 5 mg / L and sensitivity analyzes by the Monte Carlo Simulation. the coefficient of deoxygenation and reapersion, in each of the sample channels, evidencing a significance of the reuse coefficient in the determination of OD concentrations. The quality and the ecotoxicity of the water of the section studied in February and September of 2017, after the effluent discharge point, was carried out in some of its parameters of water and some metals during the year as a whole, iron, lead and water. Cancer, and consequently, the success of seafood in the development of zebrafish embryos. Thus, the present work was done with the model QUAL2Kw presented as a good tool for the execution of nominal tests in the value of $0,808 \pm 0,005$ for all the sample management. The Monte Carlo uncertainty analysis demonstrates that it is possible to present the results in a probabilistic way, knowing or assuming risks that are disregarded by the deterministic approach.

Keywords: Autodepuration. Ecotoxicity. BOD. DO. Qual2kw.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Efeito dos lançamentos de carga orgânica no OD de um rio. Adaptado de Chapra (1997).	33
Figura 2 – Esquema dos principais mecanismos interagentes na dinâmica do oxigênio dissolvido na água e no sedimento. Adaptado de Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009).	34
Figura 3 – Esquema de segmentação do QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier, Chapra e Tao (2008).	45
Figura 4 – Divisão dos trechos em elementos. Adaptado de Pelletier, Chapra e Tao (2008). ..	45
Figura 5 – Balanço de vazão em cada elemento. Fonte: Pelletier e Chapra (2008).	46
Figura 6 – Representação das cargas difusas no modelo QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier e Chapra (2008).	46
Figura 7 – Esquema do canal trapezoidal para determinação da vazão no modelo QUAL2Kw. Fonte: Pelletier e Chapra (2008).	48
Figura 8 – Representação do balanço de massa do modelo QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier e Chapra (2008).	50
Figura 9 – Modelagem cinética e processos de transferência de massa. As variáveis de estado são definidas no Quadro 7.	51
Figura 10 – Fluxograma do algoritmo genético utilizado no QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier, Chapra e Tao (2006).	52
Figura 11 – Localização da UGH Turvo e dos Bois dentre das demais UGHs da bacia do Paranaíba. Adaptado de (ANA, 2013b).	55
Figura 12 – Mapa de localização e descrição dos pontos de coleta no trecho situado a montante da foz do rio Anicuns (Elaborado pelo autor, 2016).	56
Figura 13 – Identificação de alguns pontos de monitoramento e amostragem da qualidade da água em que a), b), c), d), e) e f) retratam os pontos 1,2,4,6,7 e 8, respectivamente.	57
Figura 14 - – Realização de medição de vazão em um trecho do rio dos Bois utilizando o equipamento da SonTek RiverSurveyor ADP M9, sendo deslocado ao longo da seção transversal do curso d’água com auxílio de cordas, controladas pela equipe de pesquisa.	58
Figura 15 – Modelo do delineamento experimental do Fish Embryo Acute Toxicity (FET) Test em placas de 24 poços, onde Cn representa o controle negativo, A corresponde as amostras testadas e ci o controle interno da placa. Adaptado da OECD 236 (2013).	61

Figura 16 - Segmentação dos trechos entre os pontos de monitoramento com as abstrações e lançamentos.	64
Figura 17 – Gráfico para determinação dos coeficientes de descarga da velocidade (U) em função da vazão (Q) dos pontos 2 (a), 4 (b), 6 (c), 9 (d) e 10(e).	65
Figura 18 - Gráfico para determinação dos coeficientes de descarga da profundidade (H) em função da vazão (Q) dos pontos 2 (a), 4 (b), 6 (c), 9 (d) e 10(e).	66
Figura 19 – Faixa do coeficiente de reaeração (d^{-1}) do rio dos Bois em função da profundidade e velocidade do curso d'água segundo Covar (1976) adaptado por Chapra et al (2012).	67
Figura 20 - Resultado da calibração para OD no mês de outubro de 2015.	73
Figura 21 - Resultado da calibração para DBO no mês de outubro de 2015.	74
Figura 22 - Resultado da calibração para o pH no mês de outubro de 2015.	74
Figura 23 - Resultado da calibração para a Temperatura no mês de outubro de 2015.	74
Figura 24 - Resultado da calibração para o Norg no mês de outubro de 2015.	75
Figura 25 - Resultado da calibração para NH_4 no mês de outubro de 2015.	75
Figura 26 - Resultado da calibração para OD no mês de novembro de 2015.	77
Figura 27 - Resultado da calibração para DBO no mês de novembro de 2015.	77
Figura 28 - Resultado da calibração para o pH no mês de novembro de 2015.	78
Figura 29 - Resultado da calibração para a Temperatura no mês de novembro de 2015.	78
Figura 30 - Resultado da calibração para o Norg no mês de novembro de 2015.	78
Figura 31 - Resultado da calibração para o NH_4 no mês de novembro de 2015.	79
Figura 32 - Resultado da calibração para OD no mês de janeiro de 2016.	80
Figura 33 - Resultado da calibração para DBO no mês de janeiro de 2016.	81
Figura 34 - Resultado da calibração para o pH no mês de janeiro de 2016.	81
Figura 35 - Resultado da calibração para a Temperatura no mês de janeiro de 2016.	81
Figura 36 - Resultado da calibração para o Norg no mês de janeiro de 2016.	82
Figura 37 - Resultado da calibração para o NH_4 no mês de janeiro de 2016.	82
Figura 38 – Resultado da calibração para OD no mês de março de 2016.	83
Figura 39 - Resultado da calibração para DBO no mês de março de 2016.	84
Figura 40 - Resultado da calibração para o pH no mês de março de 2016.	84
Figura 41 - Resultado da calibração para a Temperatura no mês de março de 2016.	84
Figura 42 – Resultado da calibração para o Norg no mês de março de 2016.	85
Figura 43 – Resultado da calibração para o NH_4 no mês de março de 2016.	85
Figura 44 – Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 32,00 para a calibração do mês de outubro de 2015.	87

Figura 45 - Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 42,55, para a calibração do mês de novembro de 2015.	88
Figura 46 - Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 16,77, para a calibração do mês de janeiro de 2016.	88
Figura 47 - Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 47,36, para a calibração do mês de março de 2016.	89
Figura 48 – Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 32,00 para o mês de outubro de 2015.	90
Figura 49 - Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 42,55 para o mês de novembro de 2015.	90
Figura 50 - Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 16,77 para o mês de janeiro de 2016.	90
Figura 51 - Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 47,36 para o mês de março de 2016.	91
Figura 52 - Concentrações de Cálcio (mg/L Ca) e de Ferro (mg/L Fe) em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9) em fevereiro (a) e (b), e em setembro (c) e (d) de 2107.	93
Figura 53 - Concentrações de Chumbo ($\mu\text{g/L Pb}$) e Cobre ($\mu\text{g/L Cu}$) em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9) em fevereiro (a) e setembro (b) de 2017.	94
Figura 54 - Concentrações de Cromo ($\mu\text{g/L Cr}$), Zinco ($\mu\text{g/L Zn}$), e Manganês ($\mu\text{g/L Mn}$) em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9) em fevereiro (a) e setembro (b) de 2017.	95
Figura 55 - Taxa de sobrevivência de embriões e larvas de <i>Danio rerio</i> expostas às amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P6, P9) em fevereiro (a) e setembro (b) por 24, 48, 72 e 96 h. As barras representam a média \pm desvio padrão de três testes. Controle negativo: CN (água de manutenção) e controle positivo: CP (3,4-dicloroanilina a 4 mg/L). ..	96
Figura 56 - Taxa de eclosão de larvas de <i>Danio rerio</i> expostas a diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P6, P9) em fevereiro (a) e setembro (b). As barras representam a média \pm desvio padrão de três testes. Controle negativo: CN (água de manutenção) e controle positivo: CP (3,4-dicloroanilina a 4 mg/L).	96
Figura 57 - Taxa de efeitos de embriões e larvas de <i>Danio rerio</i> expostas a diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P6, P9) em fevereiro de 2017 (a)	

e setembro de 2017 (b). As barras representam a média \pm desvio padrão de três testes.

Controle negativo: CN.....	97
Figura 58 - Fotomicroscopia de embriões de <i>D. rerio</i> expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 24h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 24h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 24h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 24h.	98
Figura 59 - Fotomicroscopia de embriões de <i>D. rerio</i> expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do Rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 48h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 48h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 48h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 48h.	98
Figura 60 - Fotomicroscopia de embriões de <i>D. rerio</i> expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do Rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 72h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 72h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 72h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 72h. A seta vermelha indica (□) representando má absorção do saco vitelínico.	99
Figura 61 - Fotomicroscopia de embriões de <i>D. rerio</i> expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do Rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 96h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 96h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 96h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 96h.	99

LISTA DE TABELAS

Tabela 1- Padrões de qualidade de água para diversos parâmetros categorizados por classes.	31
Tabela 2 – Padrões de nitrogênio amoniacal total (mg/L) para diferentes valores de pH e categorizados por classes.	31
Tabela 3 - Coeficientes de descargas para cada trecho do rio dos Bois.	67
Tabela 4 - Valores de K_2 em função da velocidade e profundidade, distribuídos em 5 pontos de coletas nos meses de out./15, nov./15, jan./16 e mar./16.	68
Tabela 5 – Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de outubro de 2015.	69
Tabela 6 – Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de novembro de 2015.	69
Tabela 7 – Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de janeiro de 2016.	69
Tabela 8 - Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de março de 2016.	69
Tabela 9 – Resultado da calibração da constante de conversão de nitrogênio orgânico à amoniacal (K_{oa}) e da constante de conversão de nitrogênio amoniacal diretamente para nitrato (K_{an}) e seus respectivos erros.	70
Tabela 10 – Dados observados em campo do mês de outubro de 2015 para calibração no modelo QUAL2Kw.	72
Tabela 11 - Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de outubro de 2015.	73
Tabela 12 – Dados observados em campo do mês de novembro de 2015 para calibração no modelo QUAL2Kw.	76
Tabela 13 - Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de novembro de 2015.	77
Tabela 14 – Dados observados em campo do mês de janeiro de 2016 para calibração no modelo QUAL2Kw.	79
Tabela 15 - Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de janeiro de 2016.	80
Tabela 16 – Dados observados em campo do mês de março de 2016 para calibração no modelo QUAL2Kw.	83

Tabela 17 - Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de março de 2016.	83
Tabela 18 - Coeficientes calibrados referentes aos trechos simulados no QUAL2Kw.....	86
Tabela 19 - Resultados dos parâmetros físico-químicos e microbiológicos do mês de fevereiro de 2017 em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9).....	92
Tabela 20 - Resultados dos parâmetros físico-químicos e microbiológicos do mês de setembro de 2017 em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9).....	92

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Valores típicos em condições de laboratório (base e, 20°C).	38
Quadro 2 – Valores do coeficiente K_2 (dia^{-1}) segundo modelos baseados em dados hidráulicos do curso d'água.	39
Quadro 3 – Valores usuais dos coeficientes do modelo de nitrogênio em rios.	41
Quadro 4 – Coeficientes utilizados para descrever a eficiência do ajuste dos modelos. Adaptado de Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009).	42
Quadro 5 - Valores típicos para os expoentes das curvas-chave usados para determinar a velocidade e a profundidade a partir da vazão.	47
Quadro 6 – Coeficiente de rugosidade de Manning para vários tipos de canais abertos.	49
Quadro 7 – Variáveis de estado do modelo Qual2kw.	49
Quadro 8 – Localização dos pontos de monitoramento da qualidade da água com suas devidas coordenadas geográficas.	57
Quadro 9 – Parâmetros de qualidade da água com as respectivas numerações dos métodos de acordo com o Standard Methods (2012) e USEPA (1992) (*).	59
Quadro 10 – Localização dos pontos de monitoramento, das abstrações, dos lançamentos e dos tributários ao longo do trecho de 49,33 km de extensão.	63
Quadro 11 – Divisão dos trechos em ordem decrescente, a partir da extensão total de 43,33 km até zerar.	63

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AG	Algoritmo Genético
ANA	Agência Nacional das Águas
CD	Coefficiente de Determinação
CERH	Conselhos Estaduais de Recursos Hídricos
CNRH	Conselho Nacional de Recursos Hídricos
CT	Coliformes Termotolerantes
DB	Demanda Bentônica
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio
DN	Demanda Nitrogenada
<i>E. coli</i>	<i>Escherichia coli</i>
ETA	Estação de Tratamento de Água
ETE	Estação de Tratamento de Esgoto
FET	Fish Embryo Acute Toxicity
MO	Matéria Orgânica
OD	Oxigênio Dissolvido
PNRH	Política Nacional de Recursos Hídricos
P _{Total}	Fósforo Total
QUAL2EU	Enhanced Stream Water Quality Model with Uncertainty Analysis
QUAL2Kw	Stream Water Quality Model
QUASAR	Quality Simulation Along Rivers
RMEQ	Raíz da Média dos Erros ao Quadrado
SDT	Sólidos Dissolvidos Totais
SIMCAT	Simulation Catchment
SINGRH	Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos
SISNAMA	Sistema Nacional de Meio Ambiente
SST	Sólidos Suspensos Totais
ST	Sólidos Totais
TOMCAT	Temporal Overall Model for Catchments
UGH	Unidade de Gestão Hídrica
UPGRH	Unidade de Planejamento e Gerenciamento de Recursos Hídricos
USEPA	United States Environmental Protection Agency

VBA	Visual Basic for Applications
WASP7	Water Quality Analysis Simulation Program

LISTA DE SÍMBOLOS

A_c	Área molhada da seção transversal (m^2)
B_0	Largura de fundo (m)
CO_2	Molécula de gás carbônico
C_s	Concentração de saturação de OD (mg/L)
C_t	Concentração de OD no tempo t (mg/L)
D	$(C_s - C_t)$ = déficit em relação à saturação de OD no corpo receptor (mg/L)
D_0	Déficit inicial de oxigênio em relação à saturação de OD no corpo receptor
f_{nitr}	Fator de correção do coeficiente de nitrificação em função do OD
H	Altura da lâmina d'água (m).
H^+	Íon hidrogênio
H_2O	Molécula de água
K_1	Coeficiente de desoxigenação (dia^{-1})
K_2	Coeficiente de reaeração (dia^{-1})
K_{an}	Coeficiente de conversão de amônia a nitrato (dia^{-1})
K_{nitrOD}	Coeficiente de inibição da nitrificação por baixo OD (L/mg)
K_{oa}	Coeficiente de conversão de nitrogênio orgânico a amônia (dia^{-1})
L	Concentração de DBO remanescente (mg/L)
L_0	DBO remanescente em $t=0$ (mg/L)
n	Coeficiente de rugosidade de Manning
N	Número total de valores
NH_4^+	Amônia
NO_2^-	Nitrito
NO_3^-	Nitrato
N_{amon}	Amônia (mgN/L)
N_{amon0}	Amônia na mistura ($t=0$) (mgN/L)
N_{nitr}	Nitrato (mgN/L)
N_{nitr0}	Nitrato na mistura ($t=0$) (mgN/L)
N_{org}	Nitrogênio orgânico (mgN/L ou $\mu gN/L$)
N_{org0}	Nitrogênio orgânico na mistura ($t=0$) (mgN/L)

N_{tot}	Nitrogênio total (mgN/L)
$N_{\text{tot}0}$	Nitrogênio total na mistura (t=0) (mgN/L)
O_2	Molécula de oxigênio
P	Perímetro molhado (m)
Q	Vazão (m^3/s ou m^3/d)
$Q_{7,10}$	
Q_{90}	Vazão em que 90% do tempo se tem vazões iguais ou superiores a ela
Q_{95}	Vazão em que 95% do tempo se tem vazões iguais ou superiores a ela
$R_{O_2\text{amon}}$	Relação entre o consumo de oxigênio e a oxidação da amônia (4,0 a 4,3 mgO ₂ /L por mgN _{amon} /L)
S_0	Declividade do canal (m/m)
t	Tempo (dias)
U	Velocidade média do curso d'água (m/s)
Y_{Cal}	Valor calculado pelo modelo
Y_{Obs}	Valor observado
\bar{Y}_{Obs}	Média dos valores observados
y	(L_0-L) = DBO exercida em um tempo t (mg/L)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	25
2	OBJETIVOS.....	27
2.1	OBJETIVO GERAL.....	27
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	28
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	28
3.1	RECURSOS HÍDRICOS E QUALIDADE DA ÁGUA	28
3.1.1	Questões legais referentes aos recursos hídricos.....	29
3.1.2	Comportamento dos poluentes em rios	33
3.1.3	Vazões de referência.....	36
3.2	MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA	37
3.2.1	Modelos matemáticos de simulação da qualidade da água	41
3.2.2	Calibração.....	42
3.2.3	Validação	43
3.2.4	Aplicação do modelo	43
3.2.5	QUAL2Kw	43
3.2.5.1	Segmentação do modelo.....	44
3.2.5.2	Balço de vazão	45
3.2.5.3	Características hidráulicas	47
3.2.5.4	Constituintes do modelo e balanço de massa geral	49
3.2.5.5	Auto calibração do QUAL2Kw – algoritmo genético PIKAIA	51
4	MATERIAL E MÉTODOS	54
4.1	CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO	54
4.2	MONITORAMENTO DA QUALIDADE DA ÁGUA.....	55
4.3	DISCRETIZAÇÃO DOS TRECHOS	62

4.4	OBTENÇÃO DOS DADOS DE ENTRADA	65
4.5	CONFIGURAÇÃO DO MODELO QUAL2KW	70
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	72
5.1	CALIBRAÇÃO DO MODELO	72
5.2	COEFICIENTES DE REAERAÇÃO E CONSTANTES DA NITRIFICAÇÃO	86
5.3	ANÁLISE DE INCERTEZA.....	87
5.4	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE.....	89
5.5	QUALIDADE E ECOTOXICIDADE DA ÁGUA	92
6	CONCLUSÃO	100
7	RECOMENDAÇÕES	101
8	REFERÊNCIAS	103

Modelagem da qualidade da água em um trecho do rio dos Bois, Goiás.

1 INTRODUÇÃO

O crescimento populacional promove o aumento da utilização dos recursos naturais para atender o desenvolvimento das atividades econômicas, seja na indústria, na agropecuária e até mesmo para uso doméstico, implicando no aumento massivo de efluentes. Esse cenário leva à degradação da qualidade da água de corpos hídricos, uma vez que os efluentes são lançados sem tratamento, ou na maioria das vezes são tratados com baixa eficiência, elevando a carga orgânica no manancial.

A estabilização dessa carga orgânica lançada nos corpos hídricos consome oxigênio dissolvido da água, alterando o equilíbrio do ecossistema aquático. Kannel et al. (2011) define que uma boa qualidade da água dos mananciais pode ser alcançada através de uma estratégia de gerenciamento que envolva a avaliação dos impactos de poluentes na concentração de oxigênio dissolvido ao longo dos sistemas fluviais.

A diversidade dos poluentes lançados nos sistemas aquáticos associado com as exigências cada vez mais restritivas para a qualidade da água demandam ações mais efetivas e rápidas dos órgãos gestores dos recursos hídricos, refletindo na busca por métodos de avaliação mais eficientes e fidedignos com a situação real dos mananciais.

As técnicas quantitativas para avaliar os impactos de poluentes no consumo de oxigênio dissolvido nos corpos hídricos possuem uma longa história de utilização. Estas variam desde os conceitos básicos de balanço de massa, utilizados pela Comissão Real sobre Poluição em 1912, até o presente uso sofisticado de modelos matemáticos empregando softwares computacionais para simular a hidrodinâmica, dispersão e cinética de poluentes no ambiente natural (COX, 2003).

Os modelos matemáticos são definidos pela Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos, United States Environmental Protection Agency (USEPA), como um sistema de expressões matemáticas que descrevem a distribuição espacial e temporal dos constituintes da qualidade da água resultantes da advecção oriunda do escoamento e de um ou mais processos

individuais e interações dentro de algum protótipo de ecossistema aquático (USEPA, 1999). Chapra (1997) descreveu um modelo matemático como uma formulação idealizada que representa a resposta de um sistema físico a estímulos externos.

Já Von Sperling (2014), diz que os modelos matemáticos são compostos por (a) uma estrutura teórica, representada por equações matemáticas, (b) valores numéricos dos parâmetros (coeficientes) das equações e (c) dados de entrada e de saída, frequentemente compreendendo observações/medições de campo ou de laboratório, e relacionando fatores externos com a resposta do sistema.

O emprego de modelos matemáticos possibilita simular situações futuras do uso da água, definindo melhor a capacidade de assimilação de seu curso por meio dos limites de lançamentos de fontes pontuais ou para extrações de determinadas vazões, de forma que haja um risco calculado em relação a deterioração da qualidade da água conforme os padrões legais (MENDES, 2010).

Nesse contexto, a modelagem matemática é uma ferramenta imprescindível para os instrumentos de gestão dos órgãos reguladores na busca pela preservação dos ecossistemas aquáticos que garanta a qualidade da água. Esses modelos têm demonstrado excelentes resultados na elaboração de prognósticos da qualidade da água auxiliando nos processos de tomada de decisão, planejamento e na realização de ações que visem a melhor gestão dos recursos hídricos (PANAGOPOULOS; MAKROPOULOS; MIMIKOU, 2012).

A gestão dos recursos hídricos assegura que os seus usos múltiplos sejam garantidos, de forma que os parâmetros físico-químicos e bacteriológicos estejam de acordo com as necessidades locais e regionais. O diagnóstico dos mananciais constitui uma etapa fundamental para a proposição de ações visando o gerenciamento adequado, uma vez que, a partir das características iniciais observadas podem ser estabelecidas metas a serem alcançadas.

Além dos modelos matemáticos, os bioindicadores, juntamente com a gestão integrada da bacia hidrográfica, caracterizam-se como um eficiente método na busca pela preservação dos ecossistemas aquáticos e da qualidade da água, fornecendo informações para construções de programas e ações (MARTINS, 2016). Dessa maneira, a utilização de bioindicadores complementa essa análise promovendo uma avaliação integrada do meio estudado (RAUTENBERG *et al.*, 2015).

A bacia hidrográfica do rio dos Bois é de suma importância para o estado de Goiás, uma vez que concentra diversas atividades econômicas. Entretanto, neste corpo d'água, é lançado uma grande parte de esgotos domésticos sem nenhum tratamento, além de efluentes de frigoríficos, fábricas de bebidas, curtumes e outros (SECIMA, 2003).

Cabe ressaltar que na bacia hidrográfica do rio dos Bois estão concentrados inúmeros pontos de extração de areia, que provocam o desmatamento de matas ciliares e áreas de várzeas, ocasionando processos erosivos severos, com aumento dos níveis de turbidez da água, poluição química através de óleos, graxas e detergentes (SECIMA, 2003).

Considerando a necessidade de cumprir as exigências quanto ao lançamento de efluentes nos corpos hídricos, as empresas geradoras desses resíduos devem implementar sistemas de tratamento afim de minimizar os impactos no corpo hídrico e atender sua capacidade de autodepuração. A modelagem da qualidade da água do rio dos Bois pode auxiliar tanto as empresas privadas quanto o poder público a planejar e racionalizar a utilização deste recurso hídrico.

2 OBJETIVOS

Os objetivos deste trabalho estão divididos em objetivo geral e objetivos específicos, descritos a seguir:

2.1 OBJETIVO GERAL

O presente trabalho tem como objetivo geral obter um modelo para o oxigênio dissolvido (OD), demanda bioquímica de oxigênio (DBO), pH, temperatura, nitrogênio orgânico (Norg) e nitrogênio amoniacal (NH₄) através de simulações numéricas com o modelo QUAL2Kw (Stream Water Quality Model) e avaliar a qualidade da água através de análises físico-químicas e microbiológicas juntamente com ensaios de ecotoxicidade utilizando o estágio embrio-larval de zebrafish (*Danio rerio*), em um trecho do rio dos Bois – Goiás, para verificar as condições de qualidade da água do trecho de estudo frente às classes de qualidade da Resolução CONAMA 357/2005.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ◆ Calibrar o modelo QUAL2Kw para o trecho do rio dos Bois em estudo para diferentes parâmetros de qualidade da água (OD, DBO, pH, temperatura, Norg eNH₄);
- ◆ Aplicar o modelo QUAL2Kw, simulando os cenários de cargas pontuais para analisar e comparar a dinâmica do balanço hídrico e da qualidade da água;
- ◆ Integrar os ensaios de ecotoxicidade com análises físico-químicas e microbiológicas na avaliação da qualidade da água;
- ◆ Verificar as condições de qualidade da água do trecho de estudo frente às classes de qualidade da Resolução CONAMA 357/2005.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica foi estruturada de forma a apresentar os principais conceitos relacionados com a problemática apresentada anteriormente neste trabalho. Serão abordados tópicos relacionados a qualidade da água, o comportamento dos poluentes nos rios, bem como dos modelos de qualidade da água que os simulam.

3.1 RECURSOS HÍDRICOS E QUALIDADE DA ÁGUA

A disponibilidade e distribuição do volume dos recursos hídricos no Brasil é desigual, apesar de deter 14% da água do planeta. Essa discrepância traz inúmeros problemas econômicos e sociais, particularmente tratando-se da disponibilidade, demanda e saúde humana na periferia das grandes regiões metropolitanas do Brasil. Em consequência disso, uma das prioridades fundamentais é a recuperação de mananciais (TUNDISI, J. G., 2008).

Segundo Tundisi e Tundisi (2015), os principais problemas e conexões da crise hídrica no mundo são as enchentes e extremos de precipitação; a seca e a deterioração da qualidade da água e da mesma maneira as soluções para enfrentar as crises hídricas são: a redução da demanda; o reuso de água; a redução das perdas de água na rede; avanços na governança de água, tecnologias; preservação das águas subterrâneas, saneamento básico e gestão integrada de recursos hídricos, educação e capacitação de recursos humanos.

A Moção nº 57, de 16 de dezembro de 2010, que recomenda princípios e prioridades de investimento em ciência, tecnologia e inovação em recursos hídricos, agrupou as prioridades em oito grandes áreas, uma delas é a qualidade da água, na qual há demanda de estudo do impacto do lançamento de efluentes em corpos d'água, em especial em rios intermitentes, e de sua capacidade de suporte, classificada como prioridade emergente, ou seja, demandas que refletem necessidades atuais ou futuras já identificadas e que necessitam de respostas rápidas (BRASIL, 2014).

3.1.1 Questões legais referentes aos recursos hídricos

Para melhorar o gerenciamento e monitoramento dos recursos hídricos foi implantada a Política Nacional dos Recursos Hídricos (PNRH) conforme a Lei Federal 9.433/97, versada como Lei das Águas, cujos fundamentos são: I) a água como um bem de domínio público; II) a água como um recurso natural limitado, dotado de valor econômico; III) em situações de escassez, o uso prioritário dos recursos hídricos é o consumo humano e a dessedentação de animais; IV) a gestão dos recursos hídricos deve sempre proporcionar o uso múltiplo das águas; V) a bacia hidrográfica é a unidade territorial para implementação da PNRH e atuação do Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos (SINGRH); VI) a gestão dos recursos hídricos deve ser descentralizada e contar com a participação do poder público, dos usuários e da sociedade (BRASIL, 1997).

No Brasil, o enquadramento dos corpos hídricos em classes conforme seus usos preponderantes são baseados na qualidade da água e considerado um dos instrumentos da PNRH. Tal instrumento é implantado, a nível federal, cujos parâmetros avaliativos e decisórios são apresentados pela Resolução CONAMA 357/05 e, no estado de Goiás, pelo Decreto 1745/79 (BRASIL, 1997; GOIÁS, 1979).

Esta resolução prevê cinco categorias: classe especial, que apresenta as melhores qualidades, classes 1, 2, 3 e 4, cuja qualidade da água cai e com isso a possibilidade de uso, aumentando as restrições de uso da água. A classe de água denominada especial está baseada na melhor qualidade de água, sendo destinada ao abastecimento humano, com desinfecção, preservação do equilíbrio natural das comunidades aquáticas e preservação dos ambientes aquáticos em unidades de conservação de proteção integral, ou seja, permite o uso múltiplo e amplo; já a classe denominada de 4 destina-se a navegação e harmonia paisagística, o que não exige água de qualidade (BRASIL, 2005).

Os efluentes oriundos das Estações de Tratamento de Esgoto (ETE's), que são direcionados para os corpos hídricos, também devem seguir padrões de lançamentos estabelecidos pela Resolução CONAMA n° 357, de 17 de março de 2005 e devem estar de acordo com o enquadramento do rio. A Resolução n° 430, de 13 de maio de 2011, dispõe sobre as condições e padrões de lançamento de efluentes e complementa e altera em alguns artigos a Resolução CONAMA 357/05.

O enquadramento dos corpos d'água se dá de acordo com as normas e procedimentos definidos pelo Conselho Nacional de Recursos Hídricos (CNRH) e Conselhos Estaduais de Recursos Hídricos (CERH) e é definido como o estabelecimento do nível de qualidade (classe) a ser alcançado e/ou mantido em um segmento de corpo d'água ao longo do tempo. O fato de um trecho de rio estar enquadrado em determinada classe não significa, necessariamente, que esse seja o nível de qualidade que ele apresenta, mas sim aquele que se busca alcançar ou manter ao longo do tempo.

Os valores máximos estabelecidos para os parâmetros relacionados em cada uma das classes de enquadramento deverão ser obedecidos nas condições de vazão de referência, ou seja, a vazão do corpo hídrico utilizada como base para o processo de gestão, tendo em vista o uso múltiplo das águas e a necessária articulação das instâncias do Sistema Nacional de Meio Ambiente (SISNAMA) e do SINGRH.

A Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO), que retrata a quantidade de oxigênio requerida para estabilizar a matéria orgânica, o Oxigênio Dissolvido (OD), ensaios ecotoxicológicos e demais parâmetros são comumente utilizados para a avaliação da qualidade da água dos mananciais. A Tabela 1 demonstra os valores máximos admissíveis dos parâmetros citados conforme as classes definidas para águas doces de acordo com a Resolução CONAMA 357/05.

Tabela 1- Padrões de qualidade de água para diversos parâmetros categorizados por classes.

Parâmetro	Unidade	Classe 1	Classe 2	Classe 3	Classe 4
Coliformes Termotolerantes	NMP/100 mL	200 ⁽¹⁾	1000 ⁽¹⁾	4000 ⁽¹⁾⁽²⁾	...
DBO	mg/L	≤ 3	≤ 5	≤ 10	...
OD	mg/L	≥ 6,	≥ 5	≥ 4	≥ 2
Turbidez	UNT	40	100	100	...
Cor	mg PtCo/L	...	75	75	...
pH		6 a 9	6 a 9	6 a 9	6 a 9
Sólidos Dissolvidos Totais	mg/L	500	500	500	...
Nitrato	mg/L	10	10	10	...
Fósforo Total	mg/L P	0,1	0,1	0,15	...
Ferro	(mg/L Fe)	0,3	0,3	5,0	...
Cobalto	(μg/L Co)	50	50	200	...
Cádmio	(μg/L Cd)	1	1	10	...
Cromo	(μg/L Cr)	50	50	50	...
Zinco	(μg/L Zn)	180	180	5000	...
Níquel	(μg/L Ni)	25	25	25	...
Chumbo	(μg/L Pb)	10	10	33	...
Cobre	(μg/L Cu)	9	9	13	...
Manganês	(μg/L Mn)	100	100	500	...

Fonte: Resolução CONAMA 357/05 (BRASIL, 2005).

Nota: ... Dado numérico não disponível; (1) valor identificado em 80% ou mais, de pelo menos 6 amostras, coletadas durante o período de um ano, com frequência bimestral; (2) valor para fins de abastecimento público.

Nutrientes como o nitrogênio amoniacal total, de acordo com a Resolução CONAMA 357/05, apresenta os limites estabelecidos de acordo com a variação de pH do corpo hídrico como informa a Tabela 2. Já o Decreto 1745/79 define um valor máximo permitido de 0,5 mg/L de Amônia (NH_4^+) para as classes do corpo hídrico 2 e 3 independentemente do valor de pH.

Tabela 2 – Padrões de nitrogênio amoniacal total (mg/L) para diferentes valores de pH e categorizados por classes.

pH	Classe 1	Classe 2	Classe 3	Classe 4
< 7,5	3,7	3,7	13,3	...
7,5 – 8,0	2,0	2,0	5,60	...
8,0 – 8,5	1,0	1,0	2,20	...
> 8,5	0,5	0,5	1,00	...

Fonte: Resolução CONAMA 357/05 (BRASIL, 2005).

Nota: ... Dado numérico não existente.

Os ensaios ecotoxicológicos, segundo Brasil (2005), são ensaios realizados para determinar o efeito deletério de agentes físicos ou químicos a diversos organismos aquáticos. Tais efeitos podem ser subdivididos em efeito tóxico agudo e efeito tóxico crônico. O efeito tóxico agudo é o efeito deletério aos organismos vivos causado por agentes físicos ou químicos, usualmente letalidade ou alguma outra manifestação que a antecede, em um curto período de exposição. Já o efeito tóxico crônico é o efeito deletério aos organismos vivos causado por agentes físicos ou

químicos que afetam uma ou várias funções biológicas dos organismos, tais como a reprodução, o crescimento e o comportamento, em um período de exposição que pode abranger a totalidade de seu ciclo de vida ou parte dele.

Segundo Magalhães e Ferrão (2008) a inserção dos ensaios ecotoxicológicos como ferramenta de avaliação ambiental é de fundamental importância para verificar a biodisponibilidade e a interação entre os efeitos de poluentes. Apesar de ser uma ferramenta importante, são poucas as exigências da legislação brasileira com relação à ecotoxicidade de despejos de fontes poluidoras. Apenas alguns estados brasileiros, como Santa Catarina e Paraná, possuem legislação específica determinando fatores de toxicidade permitidos para cada tipo de despejo.

Estudos têm sido realizados associando o biomonitoramento aos parâmetros físico-químicos da água. Benites *et al.* (2014) avaliou o potencial mutagênico de metais como o cobre através da exposição de espécies bioindicadoras como o zebrafish (*Danio rerio*). Foi observado uma maior frequência de micronúcleos como possível consequência da contaminação por cobre, servindo de alerta aos órgãos competentes para uma maior fiscalização em relação à concentração destes poluentes, uma vez que os mananciais são utilizados como fonte de água e pesca extrativa.

As possíveis interações entre as substâncias e a presença de contaminantes não são listados na Resolução CONAMA 357/05, mas deverão ser investigadas utilizando-se ensaios ecotoxicológicos, toxicológicos, ou outros métodos cientificamente reconhecidos, se forem passíveis de causar danos aos seres vivos,

Embora não haja padrões ecotoxicológicos na presente Resolução, ela recomenda que para águas doces de classe 1 e 2, não deve ser verificado efeito tóxico crônico a organismos e para as águas de classe 3 não deve ser verificado efeito tóxico agudo a organismos.

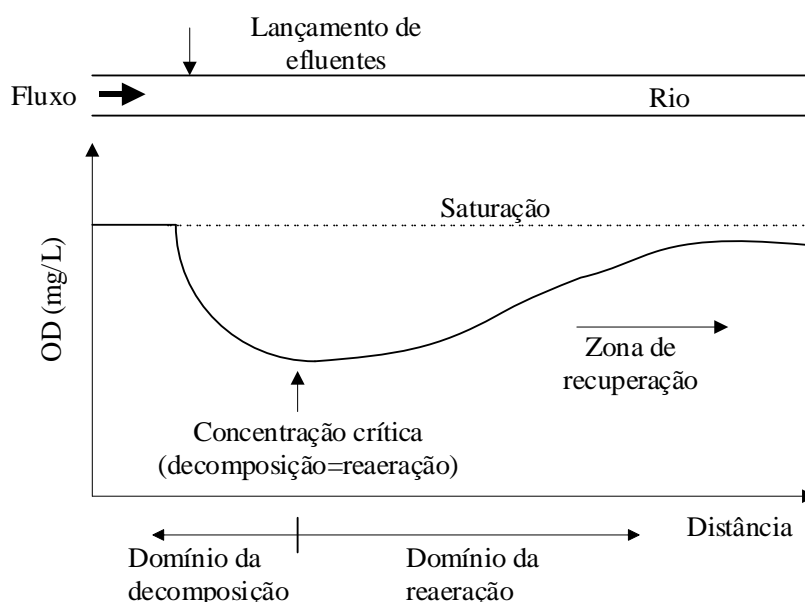
Há uma proposta de enquadramento dos corpos hídricos superficiais elaborada pela Agência Nacional das Águas (ANA) no Plano de Recursos Hídricos da Bacia do Rio Paranaíba, onde parte do Estado de Minas Gerais, Goiás e o Distrito Federal estão inseridos na Bacia do Rio Paranaíba. A DBO e o Fósforo foram eleitos como parâmetros prioritários para o enquadramento e foram propostas classes para 44 trechos dos rios, sendo que a maior parte é enquadrada como classe 2, inclusive o rio dos Bois. O único trecho especial é o rio Araguari I que se situa dentro do Parque Nacional da Serra da Canastra.

3.1.2 Comportamento dos poluentes em rios

A matéria orgânica dos efluentes lançados no corpo receptor se apresentam em suspensão, ou seja, na forma particulada que tende a sedimentar e compor o lodo de fundo, e dissolvida que permanece na massa líquida. Ambas as formas de matéria orgânica consomem oxigênio dissolvido através dos processos de estabilização realizados pelas bactérias decompositoras ao utilizarem o oxigênio disponível no meio líquido para a degradação da matéria orgânica.

O evento de reestabelecimento do equilíbrio no meio aquático, após as alterações induzidas pelos despejos de efluentes é denominado de autodepuração. Segundo Von Sperling (2014), é um fenômeno de sucessão ecológica em que a capacidade que o curso d'água tem de se recuperar é realizada por meio de mecanismos puramente naturais. É de suma importância o conhecimento desse fenômeno e da sua quantificação para que seja possível utilizar a capacidade de assimilação dos rios e impedir o lançamento de despejos acima do que possa suportar o corpo d'água. A Figura 1 apresenta o impacto dos lançamentos de efluentes com elevada carga orgânica de OD.

Figura 1 – Efeito dos lançamentos de carga orgânica no OD de um rio. Adaptado de Chapra (1997).



Há um balanço entre as fontes de consumo e as fontes de produção de oxigênio no processo de autodepuração no qual a concentração de oxigênio tende a decrescer quando a taxa de consumo é superior à taxa de produção, acontecendo o inverso quando a taxa de consumo é inferior à taxa de produção. Os principais processos interagentes no balanço do oxigênio dissolvido são a oxidação da matéria orgânica, a demanda bentônica e a nitrificação que compõem o consumo

de oxigênio, a reaeração atmosférica e a fotossíntese que compõem a produção de oxigênio, apresentados na Figura 2.

Figura 2 – Esquema dos principais mecanismos interagentes na dinâmica do oxigênio dissolvido na água e no sedimento. Adaptado de Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009).



A oxidação da matéria orgânica é o processo nos quais elétrons são removidos de uma substância, aumentando o seu estado de oxidação no qual gera produtos finais, simples e estáveis, como água e gás carbônico, correspondendo ao principal fator de consumo de oxigênio. A equação simplificada da estabilização da matéria orgânica (MO) está representada pela Equação (1).



Conforme Esteves (1998), a Demanda Bentônica (DB), ou seja, demanda de oxigênio no sedimento, é definida pelo consumo de oxigênio da comunidade formada por animais (zoobentos) e vegetais (fitobentos) que habitam o sedimento aquático ou a superfície deste. Von Sperling (2014) relata outro fator que pode causar consumo de oxigênio do sedimento, que é a reintrodução na massa líquida da matéria orgânica sedimentada anteriormente, e que não estando estabilizada, representa uma nova fonte de demanda de oxigênio.

Segundo Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009), a camada do topo do sedimento consiste em matéria particulada e nutrientes dissolvidos como nitrogênio e fósforo e a espessura da mesma é constante (cerca de 10 cm) considerado pelos modelos ecológicos. Nessa camada também ocorre parte do ciclo de nutrientes, muito importante para a qualidade da água e a bioprodução.

Além disso, é possível modelar o fluxo de ressuspensão e sedimentação sendo aplicadas a partículas de pequenas dimensões que são mais suscetíveis ao transporte na coluna d'água.

A nitrificação é um processo microbial aeróbio que envolve a transformação de amônia em nitritos (NO_2^-) e estes em nitrato (NO_3^-). O correspondente consumo de oxigênio decorrente do processo de nitrificação é denominado de Demanda Nitrogenada (DN) ou demanda de segundo estágio e é calculada usando-se um fator de conversão de 2 moles de O_2 por mol de NH_4 e a razão do peso molecular.

A transformação da amônia em nitrito se dá segundo a reação da Equação (2) e a transformação do nitrito em nitrato ocorre de acordo com a reação da Equação (3).



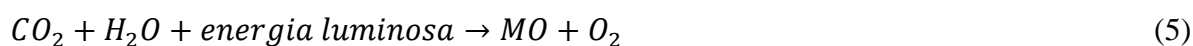
A reação global da nitrificação é soma das Equações (2) e (3).



A reaeração é a difusão do oxigênio proveniente da atmosfera que cruza a superfície da água, sendo um dos principais fatores responsáveis pela introdução de oxigênio no meio líquido (FRAGOSO JR.; FERREIRA; MARQUES, 2009; VON SPERLING, 2014). A transferência de oxigênio da fase gasosa para a fase líquida se dá através da difusão molecular e da difusão turbulenta. A primeira é bastante lenta e requer muito tempo para que o oxigênio atinja as camadas mais profundas do corpo d'água, já a segunda é bem mais eficiente, pois envolve a criação de interfaces e renovação destas interfaces para que ocorra a troca gasosa.

A difusão ocorre predominantemente em função das características hidrodinâmicas do corpo d'água como a profundidade e a velocidade. Por exemplo, rios de menor profundidade, com corredeiras, apresentam ótimas condições para turbulência sendo desprezível a difusão molecular, ao contrário de lagos que predominam a difusão molecular.

A fotossíntese é o mecanismo pelo qual plantas e algumas bactérias sintetizam compostos orgânicos, sendo característica dos organismos clorofilados, utilizando a luz como fonte de energia, segundo a reação simplificada representada pela Equação (5).



3.1.3 Vazões de referência

O conhecimento do comportamento hidrológico de um rio é essencial para manutenção dos recursos hídricos, no que diz respeito ao regime de vazão dos cursos d'água e da qualidade de água, quando se realiza estudos de dispersão de poluentes, sejam estes oriundos de fontes difusas ou pontuais (MENDES, 2010).

Conforme Von Sperling (2014), dependendo dos objetivos da simulação, os estudos de modelagem podem ser desenvolvidos com as vazões de referência, que frequentemente são as vazões observadas em um determinado período; vazão média (média anual, média do período chuvoso, média do período seco) e as vazões mínimas.

A vazão observada em um determinado período é utilizada quando se deseja calibrar o modelo, para que os dados simulados sejam os mais próximos possíveis dos dados observados no curso d'água no período em análise. A vazão média é adotada quando se deseja simular as condições médias prevalentes, quer durante o ano, durante os meses chuvosos ou durante os meses de seca.

As vazões mínimas são utilizadas para o planejamento dos recursos hídricos da bacia hidrográfica, em estudos envolvendo a poluição hídrica, tornando importante conhecer as probabilidades de ocorrência das estiagens mais severas para a avaliação do atendimento aos padrões ambientais do corpo receptor, para a diluição de despejos urbanos ou industriais, e também em processos de outorga de captação e lançamento.

Nesses casos, geralmente, as vazões mínimas de interesse são a $Q_{7,10}$ e a Q_{90} ou (Q_{95}), estimadas por métodos estatísticos levando em conta probabilidades de ocorrência. A $Q_{7,10}$ é a vazão mínima de um período de duração de sete dias consecutivos de estiagem com um período de retorno de 10 anos. Neste caso o período de retorno é o tempo médio, em anos, necessário para que ocorram vazões menores ou iguais a um certo valor, uma vez, em um ano qualquer. A Q_{90} ou (Q_{95}) é a vazão em que 90% (ou 95%) do tempo se tem vazões iguais ou superiores a ela.

Em geral, a vazão $Q_{7,10}$ é mais restritiva que as vazões Q_{90} ou (Q_{95}). O conceito de vazão de permanência tem sido utilizado por alguns órgãos ambientais como vazão de referência em estudos de impacto ambiental e atendimento à legislação. Ele é mais fácil de ser determinado e melhor compreendido que a $Q_{7,10}$.

A vazão de referência utilizada pelo órgão ambiental do Estado de Goiás é a Q_{95} e a vazão outorgável é 50% da Q_{95} de determinada seção do manancial, sendo a Q_{95} específica de 4,53 L/s/km² para a Bacia Hidrográfica do rio dos Bois (SECIMA, 2015a).

3.2 MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA

A maioria dos modelos de qualidade da água são originários de duas equações simples proposta por Streeter Phelps em 1925 para estimarem a concentração da DBO e do OD nos rios (THOMANN, Robert; FITZPATRICK, 1982).

O cálculo da DBO se processa segundo uma reação de primeira ordem na qual a velocidade de consumo da matéria orgânica carbonácea é proporcional a quantidade de matéria ainda restante na amostra. Assim essa velocidade será maior no tempo zero, onde a carga orgânica é alta, mas tende a decair progressivamente a medida que a matéria orgânica é consumida (VON SPERLING, 1996; FORMENTINI, 2010). A relação pode ser expressa pela Equação (6).

$$\frac{dL}{dt} = -K_1 L \quad (6)$$

em que, L = concentração de DBO remanescente (mg/L), t = tempo (dias), K_1 = coeficiente de desoxigenação (dia⁻¹). A integração da equação diferencial de primeira ordem dada pela Equação (6) resulta em:

$$L = L_0 e^{-K_1 \cdot t} \quad (7)$$

em que, L_0 = DBO remanescente em $t=0$ (mg/L), também denominada como demanda última.

Em termos de oxigênio dissolvido, é importante a quantificação da DBO exercida, obtida a partir da Equação (7), resultando na Equação (8).

$$y = L_0(1 - e^{-K_1 t}) \quad (8)$$

em que, $y = (L_0 - L)$ = DBO exercida em um tempo t (mg/L).

O coeficiente de desoxigenação K_1 , depende das características da matéria orgânica, além da temperatura e da presença de substâncias inibidoras. Efluentes tratados, por exemplo, possuem taxa de degradação mais lenta, pelo fato de grande parte da matéria orgânica degradável facilmente ter sido removida (BARROS *et al.*, 2011). Segundo Formentini (2010), a determinação de K_1 e de L_0 é tão importante quanto a estimativa de OD consumido em cinco

dias ($DBO_{5,20}$). O Quadro 1 identifica os valores médios de K_1 obtidos em condições de laboratório.

Quadro 1 – Valores típicos em condições de laboratório (base e, 20°C).

Origem	K_1 (dia ⁻¹)
Esgoto bruto concentrado	0,35 – 0,45
Esgoto bruto de baixa concentração	0,30 – 0,40
Efluente primário	0,30 – 0,40
Efluente secundário	0,12 – 0,24
Curso d'água com águas limpas	0,08 – 0,20

Fonte: Adaptado de Fair et al (1973) e Arceivala (1981) *apud* de Von Sperling (2014).

Semelhantemente ao cálculo da DBO, a reaeração, ou seja, a taxa de transferência do oxigênio da atmosfera para a água é determinada por uma reação de primeira ordem representada pela Equação (9).

$$\frac{dD}{dt} = -K_2 D \quad (9)$$

em que, $D = (C_s - C_t)$ = déficit em relação à saturação de OD no corpo receptor (mg/L), C_t = concentração de OD no tempo t (mg/L), C_s = concentração de saturação de OD (mg/L), K_2 = Coeficiente de reaeração (dia⁻¹).

O valor do coeficiente de reaeração K_2 pode ser estimado por três métodos: valores médios tabelados, valores em função das características hidráulicas do corpo d'água e valores correlacionados com a vazão do curso d'água. Os métodos empíricos baseados em características hidráulicas do curso d'água (profundidade, velocidade) são uma prática corrente no contexto da modelagem do oxigênio dissolvido, pelo fato de poderem ser aplicados em distintas condições de vazão e na ausência de condições de se medir diretamente este coeficiente, torna-se uma alternativa prática (VON SPERLING, 2014).

Há diversas fórmulas conceituais e empíricas, que relacionam K_2 com a profundidade e a velocidade do curso d'água. No entanto, no Quadro 2, apresentam-se três das principais fórmulas que são as mais utilizados de acordo com Chapra (1997), com faixas de atuação que se complementam e com dados de entrada facilmente obtidos.

Quadro 2 – Valores do coeficiente K_2 (dia^{-1}) segundo modelos baseados em dados hidráulicos do curso d'água.

Pesquisador	Fórmula	Condições de aplicação
O'Connor & Dobbins (1958)	$3,93. U^{0,5} H^{-1,5}$	$0,6\text{m} \leq H < 4,0\text{m}$ $0,05\text{m/s} \leq U < 0,8\text{m/s}$
Churchill <i>et al</i> (1962)	$5,0. U^{0,97} H^{-1,67}$	$0,6\text{m} \leq H < 4,0\text{m}$ $0,8\text{m/s} \leq U < 1,5\text{m/s}$
Owens-Gibbs (Owens <i>et al.</i> , 1964)	$5,3. U^{0,67} H^{-1,85}$	$0,1\text{m} \leq H < 0,6\text{m}$ $0,05\text{m/s} \leq U < 1,5\text{m/s}$

Fonte: Adaptado de Von Sperling (2014).

Notas: U = velocidade do curso d'água (m/s); H = altura da lâmina d'água (m).

O modelo de OD é constituído por uma equação diferencial ordinária, com dois termos, sendo um relativo a oxidação da parte biodegradável da matéria orgânica e o outro ao fluxo de oxigênio da reaeração atmosférica, ou seja, a junção dos processos que ocorrem na Equação (6) e (9). A taxa de variação do déficit de oxigênio com o tempo pode ser expressa pela Equação (10):

$$\frac{dD}{dt} = K_1 L - K_2 D \quad (10)$$

A solução dessa equação conduz a Equação (11) e representa a equação geral que expressa a variação do déficit de oxigênio em função do tempo.

$$D_t = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) + D_0 e^{-K_2 t} \quad (11)$$

em que, D_0 = déficit inicial em relação à saturação de OD no corpo receptor (mg/L), L_0 = concentração inicial de DBO (mg/L).

A modelagem das formas de nitrogênio presentes no meio líquido como o nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal, nitrito e nitrato, torna-se importante, uma vez que implica no consumo de oxigênio do meio líquido. A transformação de nitrito a nitrato é relativamente rápida, o que propicia a que vários modelos de qualidade da água tratem conjuntamente o nitrito e o nitrato como forma única de conversão da amônia a nitrato.

O conjunto dos processos pertinentes do modelo simplificado de nitrogênio, ou seja, nitrogênio orgânico, amônia, nitrato e nitrogênio total, estão representadas pelas Equações (12), (13), (14) e (15), respectivamente.

$$\frac{dN_{org}}{dt} = -K_{oa} N_{org} \quad (12)$$

$$\frac{dN_{amon}}{dt} = K_{oa} N_{org} - K_{an} N_{amon} \quad (13)$$

$$\frac{dN_{nitr}}{dt} = K_{an} N_{amon} \quad (14)$$

$$N_{tot} = N_{org} + N_{amon} + N_{nitr} \quad (15)$$

em que, N_{tot} = nitrogênio total (mgN/L), N_{org} = nitrogênio orgânico (mgN/L), N_{amon} = amônia (mgN/L), N_{nitr} = nitrato (mgN/L), K_{oa} = coeficiente de conversão de nitrogênio orgânico a amônia (dia^{-1}), K_{an} = coeficiente de conversão de amônia a nitrato (coeficiente de nitrificação) (dia^{-1}).

A integração analítica das Equações de (12) a (14) conduz a:

$$N_{org} = N_{org0} e^{-K_{oa} t} \quad (16)$$

$$N_{amon} = N_{amon0} e^{-K_{an} t} + \frac{K_{oa} N_{org0}}{K_{an} - K_{oa}} (e^{-K_{oa} t} - e^{-K_{an} t}) \quad (17)$$

$$N_{nitr} = N_{tot0} - (N_{org} + N_{amon}) \quad (18)$$

em que, N_{org0} = nitrogênio orgânico na mistura ($t=0$) (mgN/L), N_{amon0} =amônia na mistura ($t=0$) (mgN/L), N_{nitr0} = nitrato na mistura ($t=0$) (mgN/L), N_{tot0} = nitrogênio total na mistura ($t=0$) (mgN/L).

A cada 1,0 mg/L de amônia oxidada corresponde um consumo de OD entre 4,0 e 4,3 mg/L. Assim temos como relacionar o consumo de OD devido à nitrificação com a Equação (14) relacionada à oxidação da amônia, originando a Equação (19) e (20) na sua forma integrada analiticamente.

$$\frac{dD}{dt} = -R_{O2amon} K_{an} N_{amon} \quad (19)$$

$$D = R_{O2amon} N_{amon0} e^{-K_{an} t} \quad (20)$$

em que, $D = (C_s - C)$ déficit de oxigênio (mg/L), N_{amon0} = concentração de amônia na mistura ($t=0$) (mg/L), R_{O2amon} = relação entre o consumo de oxigênio e a oxidação da amônia (4,0 a 4,3 mgO_2/L por $\text{mgN}_{amon}/\text{L}$).

Em relação a equação geral do déficit de OD na Equação (11), pode-se simplesmente somar, ao déficit geral, o déficit relacionado à nitrificação dada pela Equação (21).

$$Dt = \frac{R_{O2amon} \cdot K_{an} \cdot N_{amon0}}{K_2 - K_{an}} (e^{-K_{an} t} - e^{-K_2 t}) \quad (21)$$

O Quadro 3 apresenta um resumo dos valores típicos dos coeficientes de reação (20°C) do modelo simplificado de nitrogênio,

Quadro 3 – Valores usuais dos coeficientes do modelo de nitrogênio em rios.

Símbolo	Descrição	Unidade	Valores usuais do coeficiente (20°C)
K_{oa}	Coef. de conversão do N orgânico a amônia	d ⁻¹	0,20 a 0,25
K_{an}	Coef. de conversão da amônia a nitrato	d ⁻¹	- Cursos d'água profundos: 0,10 a 0,50 d ⁻¹ - Cursos d'água rasos: 0,20 a 1,00 d ⁻¹ ou mais
R_{Ozamon}	Relação entre o oxigênio consumido por cada unidade de amônia oxidada	mgO ₂ /mgN _{amon}	4,0 a 4,3
f_{nitr}	Fator de correção do coeficiente de nitrificação em função do OD	-	$f_{nitr} = 1 - e^{-K_{nitrOD} OD}$
K_{nitrOD}	Coefficiente de inibição da nitrificação por baixo OD	L/mg	0,60

Fonte: Adaptado de Von Sperling (2014).

3.2.1 Modelos matemáticos de simulação da qualidade da água

Kannel et al. (2011) fizeram uma revisão dos seis modelos de domínio público mais utilizados de qualidade de água e que simulam oxigênio dissolvido em rios e córregos. Os modelos apresentados foram SIMCAT (Simulation Catchment), TOMCAT (Temporal Overall Model for Catchments), QUAL2Kw, QUAL2EU (Enhanced Stream Water Quality Model with Uncertainty Analysis), WASP7 (Water Quality Analysis Simulation Program) e QUASAR (Quality Simulation Along Rivers). Por meio das pesquisas os autores concluíram que os modelos apresentam diferenças na representação, nos dados de entrada, nas suposições e na capacidade de modelagem. Essa comparação mostrou que os modelos SIMCAT e TOMCAT são os mais simples, porém úteis para fazer uma análise rápida do impacto das fontes pontuais. QUAL2EU é bastante utilizado, no entanto não fornece a conversão de algas mortas para a DBO carbonácea. O modelo QUAL2Kw inclui um sistema automático de calibração e apresenta novas interações constituintes. WASP7 e QUASAR requerem grande quantidade de dados e dificultam a justificativa do tempo e custos necessários para esses modelos complexos. Sendo assim não há um único modelo que possa abordar todas as funcionalidades requeridas, portanto a escolha do modelo deve depender das necessidades de uma aplicação específica.

3.2.2 Calibração

A calibração, ou seja, a estimativa dos coeficientes integrantes das equações, é uma parte essencial do desenvolvimento de qualquer modelo e visa obter um bom ajuste entre os dados medidos em campo.

O método mais comum para a estimativa de parâmetros é o da minimização de uma função objetivo representando a soma dos quadrados dos erros. Define-se erro ou resíduo como a diferença entre o valor observado e o valor estimado.

A calibração pode ser feita manualmente, variando-se os valores dos parâmetros de forma que a soma dos quadrados dos resíduos diminua, até que se obtenha um bom ajuste considerado pelo analista como satisfatório, e automaticamente, por meio de algum método de otimização que faça a busca entre possíveis valores dos coeficientes, e que, por meio de um algoritmo, convirja no conjunto de valores que conduza à menor soma dos quadrados dos resíduos.

De acordo com Von Sperling (2014) e Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009), há várias formas de se avaliar o ajuste de um modelo. Dentre eles temos a visualização de gráficos; o Coeficiente de Determinação (CD) de Nash-Sutcliffe (R^2) que prioriza a comparação de valores com a média dos valores observados; Raíz da média dos erros ao quadrado invertido (RMEQI), prevalecendo o ajuste de valores de pequena ordem, a raiz da média dos erros ao quadrado (RMEQ); o erro relativo; e a análise de regressão entre os valores estimados e observados. Tais equações estão representadas pelo Quadro 4.

Quadro 4 – Coeficientes utilizados para descrever a eficiência do ajuste dos modelos. Adaptado de Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009).

Coeficientes	Equação ¹
Coeficiente de determinação de Nash-Sutcliffe (R^2)	$CD = 1 - \frac{\sum(Y_{Obs}(t) - Y_{Cal}(t))^2}{\sum(Y_{Obs}(t) - \bar{Y}_{Obs}(t))^2}$
Raíz da média dos erros ao quadrado (RMEQ)	$RMEQ = \sqrt{\frac{\sum(Y_{Obs}(t) - Y_{Cal}(t))^2}{N}}$
Raíz da média dos erros ao quadrado invertido (RMEQI)	$RMEQI = \sqrt{\frac{\sum\left(\frac{1}{Y_{Obs}(t)} - \frac{1}{Y_{Cal}(t)}\right)^2}{N}}$
Erro relativo	$ER(\%) = 100 \frac{ \bar{Y}_{Obs} - \bar{Y}_{Cal} }{\bar{Y}_{Obs}}$

Nota: ¹ Y_{Obs} é o valor observado, Y_{Cal} é o valor calculado pelo modelo, \bar{Y}_{Obs} é a média dos valores observados e N é o número total de valores.

3.2.3 Validação

A validação corresponde à avaliação do ajuste do modelo submetido a condições diferentes daquelas usadas na calibração. Para tanto, utiliza-se um ou mais conjuntos de dados experimentais independentes e distintos dos dados usados na calibração. Caso o modelo não dê bons ajustes aos novos conjuntos de dados, deve-se reavaliá-lo e tentar novas calibrações. Caso o modelo dê bons ajustes aos novos conjuntos de dados, considera-se que o modelo possa estar validado.

3.2.4 Aplicação do modelo

As aplicações dos modelos considerados válidos podem ter diversos objetivos, tais como gerar hipóteses, compreender melhor o problema, explicar o fenômeno, analisar o comportamento das variáveis de estado, fazer previsões e tomar decisões a partir dos resultados observados de diversos cenários de estudo para que seja possível o manejo de situações associadas ao problema.

3.2.5 QUAL2Kw

O modelo QUAL2Kw foi desenvolvido originalmente por Chapra, S.C, da Universidade de Tufts. Trata-se uma versão modernizada do modelo QUAL2E que é um modelo unidimensional de estado permanente, baseado na solução de equações diferenciais de advecção - dispersão, em todos os seus termos, por um esquema implícito de diferenças finitas, aplicável para rios dendríticos (BROWN; BARNWELL, 1987).

O QUAL2Kw foi selecionado para o presente estudo por ser o modelo oficial da USEPA e por ter sido utilizado em diversas pesquisas para verificar a autodepuração de vários rios, inclusive no Brasil, sendo utilizado por Bottino *et al.* (2010), Knapik *et al.* (2011), Moruzzii *et al.* (2012) e Sardinha *et al.* (2008) e em outros países, como China, Coréia, Irã, EUA (FLYNN *et al.*, 2015; JAMSHIDI *et al.*, 2015; PARK; LEE, Y. S., 2002; ZHANG *et al.*, 2014).

A estrutura do QUAL2Kw inclui novos elementos, por exemplo, são usadas duas formas de DBO carbonácea para representar o carbono orgânico, a lentamente oxidável e rapidamente oxidável, além de partículas de matéria orgânica não viva (detritos) serem simuladas. Tal modelo adapta a anóxica por redução das reações de oxidação à ordem zero para baixas concentrações de OD. A desnitrificação é modelada como reação de primeira ordem que se

torna mais pronunciada em baixas concentrações de OD. A interação entre sedimento e água são simulados como função da sedimentação da matéria orgânica particulada, reações com os sedimentos e a concentração das formas solúveis nas camadas de água superiores.

Tanto a alcalinidade quanto o carbono inorgânico são simulados e o pH do rio é então simulado baseado nessas duas quantificações. Um patógeno genérico é simulado e a sua remoção é determinada em função da temperatura, luz e sedimentação. Há simulação explícita do efeito de quedas d'água em função de cachoeiras e barragens na transferência de gases.

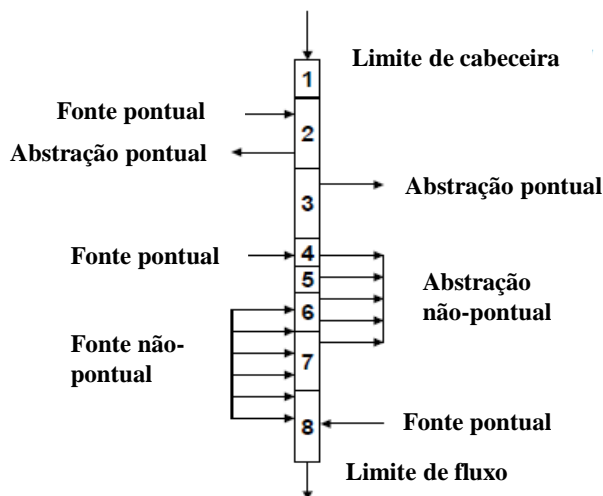
A auto calibração dos parâmetros é realizada através do algoritmo genético PIKAIA. No entanto, a estrutura do QUAL2Kw não inclui um módulo de análise de incerteza e não contempla derivações, uma vez que só simula o rio principal.

Segundo Pelletier, Chapra e Tao (2008) o QUAL2Kw é executado no ambiente do *Microsoft Windows* pelo *Microsoft Excel* com algoritmo implementado em linguagem Fortran 95 compilado que é executado pelo programa Excel Visual Basic for Applications (VBA). O Excel é usado como a interface gráfica do usuário para entrada, execução do modelo e visualização da saída. O modelo resolve as equações internas através de integração numérica direta pelo método de Euler ou o método Runge-Kutta, o primeiro método é o mais simples, pois requer passos de integração menores que o segundo.

3.2.5.1 Segmentação do modelo

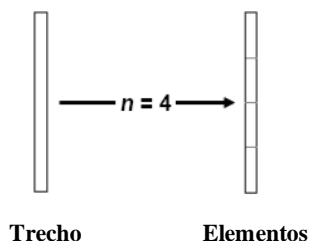
A segmentação no modelo QUAL2E só poderia ser igualmente espaçada. Já no QUAL2Kw é possível simular trechos de comprimentos diferentes e ainda podem-se adicionar múltiplos lançamentos e abstrações em qualquer trecho, fornecendo uma maior liberdade ao usuário caso necessite de maior resolução em um determinado trecho. O modelo representa o rio como uma série de trechos, com características hidráulicas constantes como mostrado na Figura 3 e os tributários não são modelados explicitamente, mas podem ser representados como fontes pontuais. Os trechos são numerados em ordem ascendente, ou seja, da nascente até a foz do rio principal.

Figura 3 – Esquema de segmentação do QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier, Chapra e Tao (2008).



Qualquer trecho do modelo pode ser ainda dividido em uma série de elementos computacionais igualmente espaçados como expresso pela Figura 4 e para cada elemento, é feito um balanço hidrológico em termos de vazão (m³/s), balanço energético em termos de temperatura e balanço de massa em termos de concentração.

Figura 4 – Divisão dos trechos em elementos. Adaptado de Pelletier, Chapra e Tao (2008).



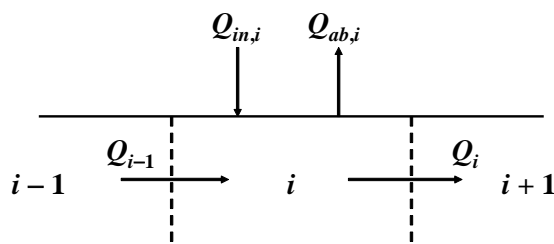
3.2.5.2 Balanço de vazão

Um equilíbrio de vazão em regime permanente é implementado para cada trecho do modelo pela Equação (22).

$$Q_i = Q_{i-1} + Q_{in,i} - Q_{ab,i} \tag{22}$$

em que, Q_i = vazão afluente do trecho i para o trecho a jusante $i+1$ (m³/d), Q_{i-1} = vazão afluente a montante $i-1$ (m³/d), $Q_{in,i}$ = vazão total afluente de fontes pontuais ou não pontuais (m³/d), e $Q_{ab,i}$ = vazão total afluente devido a abstrações pontuais e não pontuais (m³/d). A Figura 5 representa uma ilustração do balanço de vazões para cada trecho.

Figura 5 – Balanço de vazão em cada elemento. Fonte: Pelletier e Chapra (2008).



A vazão total afluyente das fontes é calculada como:

$$Q_{in,i} = \sum_{j=1}^{psi} Q_{ps,i,j} + \sum_{j=1}^{npsi} Q_{nps,i,j} \quad (23)$$

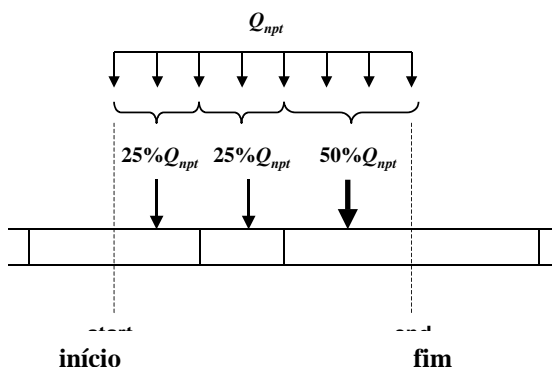
em que, $Q_{ps,i,j}$ = j -ésima fonte pontual afluyente ao elemento i (m^3/d), psi = número total de fontes pontuais ao elemento i , $Q_{nps,i,j}$ = j -ésima fonte não pontual afluyente ao elemento i (m^3/d) e $npsi$ = número total de entradas de fontes não pontuais ao elemento i . A vazão total de abstrações é calculada como:

$$Q_{ab,i} = \sum_{j=1}^{pai} Q_{pa,i,j} + \sum_{j=1}^{npai} Q_{npa,i,j} \quad (24)$$

em que, $Q_{pa,i,j}$ = j -ésima fonte pontual abstraída do elemento i (m^3/d), pai = o número total de abstrações pontuais ao elemento i , $Q_{npa,i,j}$ = j -ésima fonte de abstração não pontual ao elemento i (m^3/d), e $npai$ = número total de fontes de abstração não pontuais ao elemento i .

As fontes não pontuais (cargas difusas) e as abstrações são modeladas como fontes lineares, conforme a Figura 6. As fontes ou abstrações não pontuais são demarcadas pelos seus pontos de início e fim e a vazão é distribuída para cada trecho de forma ponderada.

Figura 6 – Representação das cargas difusas no modelo QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier e Chapra (2008).



3.2.5.3 Características hidráulicas

Depois de calculada a vazão efluente para cada elemento, a profundidade e a velocidade podem ser calculadas de três maneiras: vertedores, coeficientes de descargas ou equação de Manning.

◆ Coeficientes de descarga

Equações exponenciais podem ser usadas para relacionar a velocidade média e a profundidade em função da vazão para os elementos no trecho:

$$U = aQ^b \quad (25)$$

$$H = \alpha Q^\beta \quad (26)$$

em que, U = velocidade média (m/s), H = profundidade (m), a , b , α e β são coeficientes empíricos e são obtidos a partir das curvas de velocidade-vazão da Equação (25) e curva-chave da Equação (26), respectivamente. Os valores de velocidade e profundidade podem então ser utilizados para determinar a área e a largura da seção transversal pelas equações:

$$A_c = \frac{Q}{U} \quad (27)$$

$$B = \frac{A_c}{H} \quad (28)$$

Os expoentes b e β possuem valores típicos e são apresentados no Quadro 5.

Quadro 5 - Valores típicos para os expoentes das curvas-chave usados para determinar a velocidade e a profundidade a partir da vazão.

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

Fonte: Pelletier e Chapra (2008).

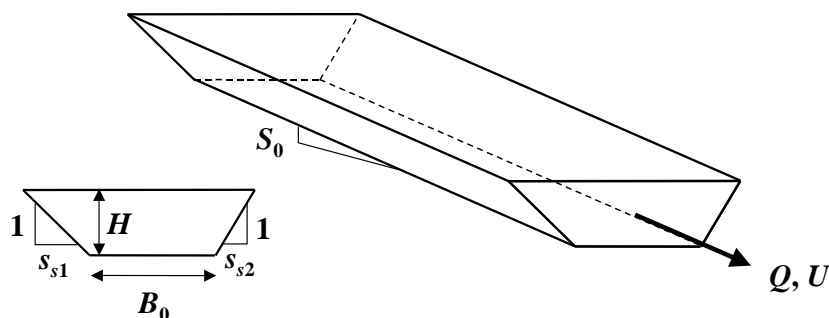
◆ Equação de Manning

Cada elemento é idealizado como um canal trapezoidal representado pela Figura 7. Em condições de escoamento permanente e uniforme, a equação de Manning pode ser usada para expressar a relação entre vazão e profundidade como descrito pela Equação (29).

$$Q = \frac{S_0^{1/2}}{n} \frac{A_c^{5/3}}{P^{2/3}} \quad (29)$$

em que: Q = vazão (m^3/s), S_0 = declividade do canal (m/m), n = coeficiente de rugosidade de Manning, A_c = área molhada da seção transversal (m^2) e P = o perímetro molhado (m). A Figura 7 apresenta o esquema do canal trapezoidal representativo no modelo QUAL2Kw.

Figura 7 – Esquema do canal trapezoidal para determinação da vazão no modelo QUAL2Kw. Fonte: Pelletier e Chapra (2008).



A área da seção transversal de um canal trapezoidal é calculada como:

$$A_c = [B_0 + 0.5(s_{s1} + s_{s2})H]H \quad (30)$$

em que: B_0 = largura de fundo (m), s_{s1} e s_{s2} = as duas declividades do talude como mostrado na Figura 7 (m/m), e H = profundidade (m). O perímetro molhado é determinado por meio da Equação (31).

$$P = B_0 + H\sqrt{s_{s1}^2 + 1} + H\sqrt{s_{s2}^2 + 1} \quad (31)$$

Após a substituição das Equações (30) e (31), a Equação (29) pode ser resolvida iterativamente para determinar a profundidade, então:

$$H_k = \frac{(Qn)^{3/5} \left(B_0 + H_{k-1} \sqrt{s_{s1}^2 + 1} + H_{k-1} \sqrt{s_{s2}^2 + 1} \right)^{2/5}}{S^{3/10} [B_0 + 0.5(s_{s1} + s_{s2})H_{k-1}]} \quad (32)$$

em que $k = 1, 2, n, \dots$, no qual n = número de iterações. Um chute inicial de $H_0 = 0$ é empregada. O método é finalizado quando o erro estimado fica abaixo de um valor especificado de $1 E^{-5} \%$. O erro estimado é calculado na Equação (33).

$$\varepsilon_a = \left| \frac{H_{k+1} - H_k}{H_{k+1}} \right| \times 100\% \quad (33)$$

A área da seção transversal pode ser determinada com a Equação (30) e a velocidade pode então ser determinada a partir da equação de continuidade:

$$U = \frac{Q}{A_c} \quad (34)$$

A largura média do elemento, B (m) pode ser calculada como:

$$B = \frac{A_c}{H} \quad (35)$$

Os valores sugeridos para o coeficiente Manning para diferentes superfícies estão listados no Quadro 6.

Quadro 6 – Coeficiente de rugosidade de Manning para vários tipos de canais abertos.

MATERIAL	<i>n</i>
Canais artificiais	
Concreto	0,012
<i>Fundo de pedra com laterais de:</i>	
Concreto	0,020
Pedra coberta com argamassa	0,023
Pedras soltas no leito do canal	0,033
Canais naturais	
Limpo e reto	0,025-0,04
Limpo e sinuoso	0,03-0,05
Com vegetação, poças e sinuoso	0,05
Córregos de montanha com pedregulhos	0,04-0,10
Com arbustos, madeira	0,05-0,20

Fonte: Adaptado de Chow, Maidment e Mays (1988) *apud* Pelletier e Chapra (2008).

3.2.5.4 Constituintes do modelo e balanço de massa geral

O modelo simula o transporte e o destino de uma série de constituintes listados no Quadro 7. Os constituintes na coluna de água são indicados pelo índice "1" ou nenhum subscrito, e na zona hiporreica são indicados pelo subíndice "2", exceto para as algas de fundo na coluna de água (a_b , IN_b , IP_b) e bactérias heterotróficas na zona de sedimentação hiporreica (a_h).

Quadro 7 – Variáveis de estado do modelo Qual2kw.

Variável	Símbolo	Unidade
Condutividade	s_1, s_2	μmhos
Sólidos Inorgânicos Suspensos	$m_{i,1}, m_{i,2}$	mgD/L
Oxigênio Dissolvido	o_1, o_2	mgO ₂ /L
DBOC _{slow}	$c_{s,1}, c_{s,2}$	mg O ₂ /L
DBOC _{fast}	$c_{f,1}, c_{f,2}$	mg O ₂ /L
Nitrogênio Orgânico	$n_{o,1}, n_{o,2}$	μgN/L
Nitrogênio Amoniacal	$n_{a,1}, n_{a,2}$	μgN/L
Nitrato	$n_{n,1}, n_{n,2}$	μgN/L
Fósforo Orgânico	$p_{o,1}, p_{o,2}$	μgP/L
Fósforo inorgânico	$p_{i,1}, p_{i,2}$	μgP/L

Quadro 7 – Variáveis de estado do modelo Qual2kw.

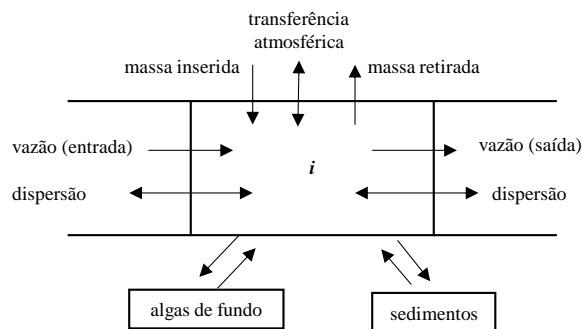
Variável	Símbolo	Unidade
Fitoplâncton	$a_{p,1}, a_{p,2}$	$\mu\text{gA/L}$
Detritos	$m_{o,1}, m_{o,2}$	mgD/L
Patógenos	x_1, x_2	cfu/100 mL
Alcalinidade	Alk_1, Alk_2	mgCaCO_3/L
Carbono Inorgânico Total	$c_{T,1}, c_{T,2}$	mole/L
Algas de fundo	a_b, a_h	gD/m^2
Algas de fundo - nitrogênio	IN_b	mgN/m^2
Algas de fundo - fósforo	IP_b	mgP/m^2

O balanço de massa é descrito pela Equação (36) e representado na Figura 8, considerando as entradas e saídas, a dispersão longitudinal, a geração e consumo da substância dentro do volume de controle, exceto para as variáveis relacionadas às algas de fundo

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} c_{i-1} - \frac{Q_i}{V_i} c_i - \frac{Q_{ab,i}}{V_i} c_i + \frac{E'_{i-1}}{V_i} (c_{i-1} - c_i) + \frac{E'_i}{V_i} (c_{i+1} - c_i) + \frac{W_i}{V_i} + S_i + \frac{E'_{hyp,i}}{V_i} (c_{2,i} - c_i) \quad (36)$$

em que, W_i = carga externa do componente no elemento i (g/d ou mg/d), S_i = fontes e abstrações do componente devido às reações e mecanismos de transferência de massa ($\text{g/m}^3/\text{d}$ ou $\text{mg/m}^3/\text{d}$). A troca de massa entre a superfície da água e a zona de sedimento é dada pela troca de vazões no elemento i , sendo $E'_{hyp,i}$ = vazão (m^3/d) e pela diferença da concentração na superfície de água (c_i) e da zona de sedimento ($c_{2,i}$).

Figura 8 – Representação do balanço de massa do modelo QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier e Chapra (2008).



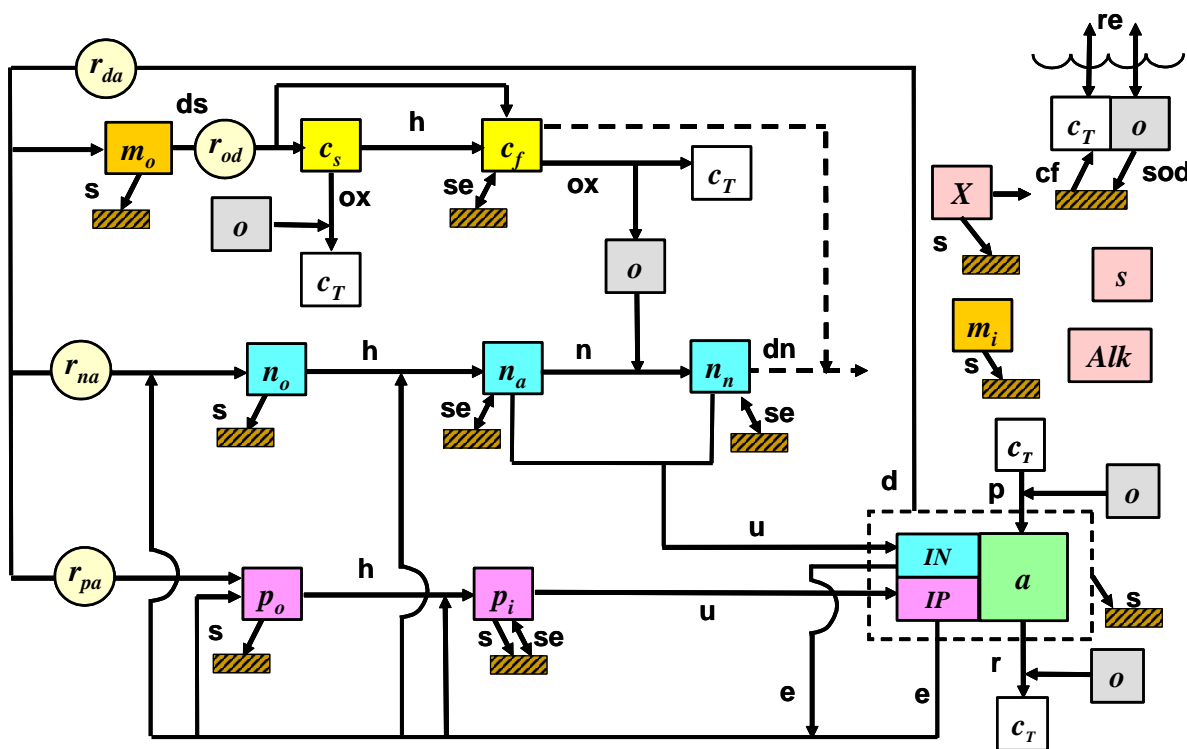
As cargas externas são computadas como:

$$W_i = \sum_{j=1}^{psi} Q_{ps,i,j} c_{ps,i,j} + \sum_{j=1}^{npsi} Q_{nps,i,j} c_{nps,i,j} \quad (37)$$

em que, $c_{ps,i,j}$ = j -ésima concentração da fonte pontual no elemento i (mg/L ou $\mu\text{g/L}$) e $c_{nps,i,j}$ = j -ésima concentração da fonte difusa no elemento i (mg/L ou $\mu\text{g/L}$).

As fontes e abstrações para as variáveis de estado são retratadas na Figura 9, com exceção das concentrações internas de nitrogênio e fósforo nas algas de fundo. Os processos cinéticos são a dissolução (ds), hidrólise (h), oxidação (ox), nitrificação (n), desnitrificação (dn), fotossíntese (p), respiração (r), excreção (e), morte (d), respiração/excreção (rx). Os processos de transferência de massa são a reaeração (re), a sedimentação (s), a demanda de oxigênio do sedimento (SOD), a transferência de sedimentos (se) e o fluxo de carbono inorgânico dos sedimentos (cf). Além destas variáveis de estado, o modelo computa variáveis compostas como o carbono orgânico total, nitrogênio total, fósforo total, nitrogênio Kjeldahl e sólidos suspensos totais que também são incluídas na calibração.

Figura 9 – Modelagem cinética e processos de transferência de massa. As variáveis de estado são definidas no Quadro 7.



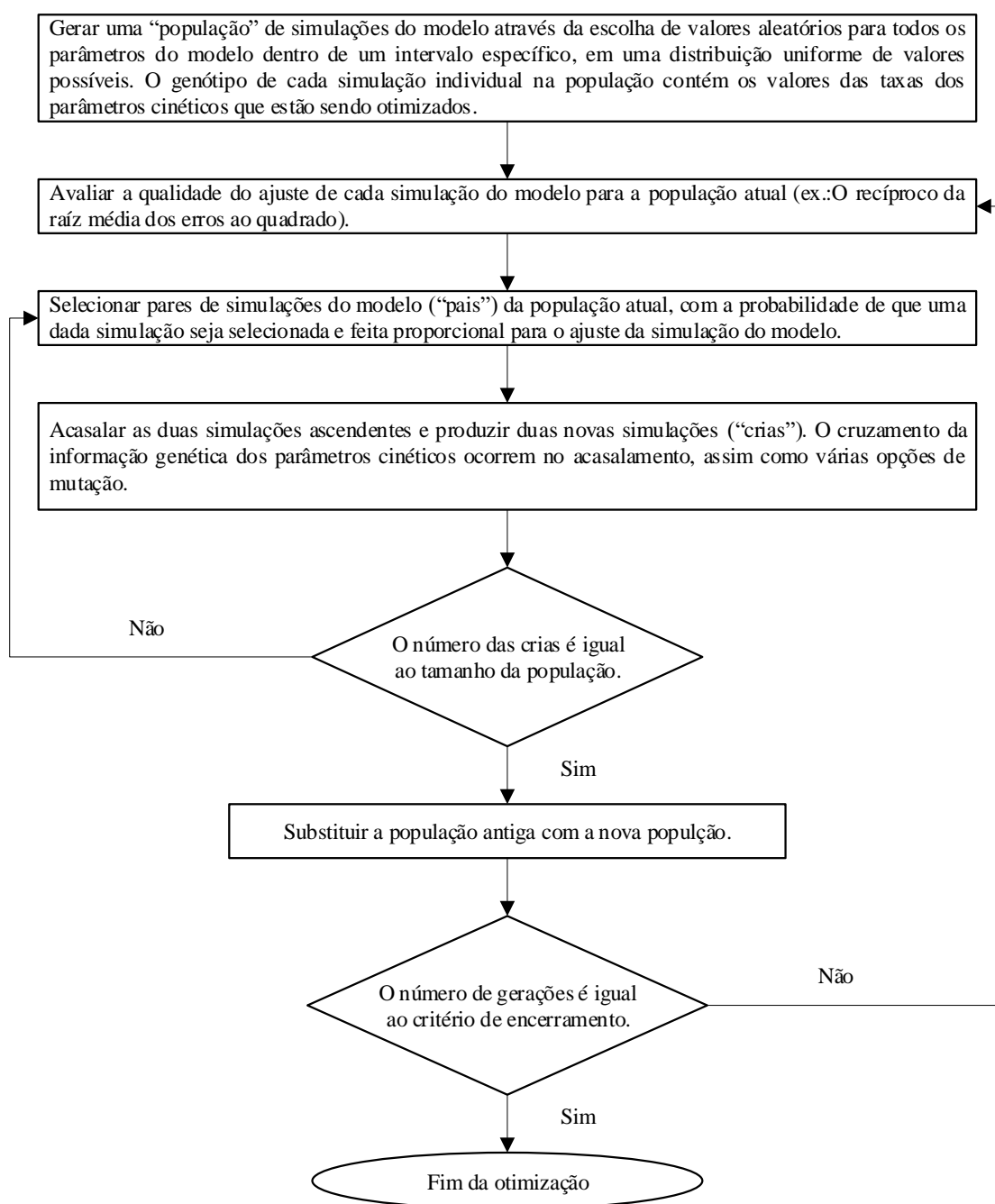
Fonte: Pelletier e Chapra (2008).

3.2.5.5 Auto calibração do QUAL2Kw – algoritmo genético PIKAIA

O QUAL2Kw tem a capacidade de calibrar automaticamente alguns parâmetros selecionados. A calibração é realizada pelo algoritmo genético (AG) PIKAIA, desenvolvido por Charbonneau e Knapp (1995). O AG PIKAIA é adaptável para uso em uma ampla variedade de aplicações de modelagem. O código original Fortran 77 para PIKAIA foi traduzido para Excel VBA para uso no QUAL2Kw (PELLETIER; CHAPRA; TAO, 2006).

O AG maximiza a qualidade dos resultados do modelo em comparação com os dados medidos e realiza sua tarefa de maximização em um número selecionado pelo usuário de gerações para definir uma população. O tamanho da população permanece constante ao longo do processo evolutivo. Em vez de evoluir a população até que algum critério de tolerância predefinido seja satisfeito, o AG leva a evolução para um número de gerações especificado pelo usuário (PELLETIER; CHAPRA; TAO, 2006). Um fluxograma do AG PIKAIA usado no QUAL2Kw é mostrado na Figura 10.

Figura 10 – Fluxograma do algoritmo genético utilizado no QUAL2Kw. Adaptado de Pelletier, Chapra e Tao (2006).



O objetivo do PIKAIA é maximizar uma função objetivo $f(x)$ e a especificação dessa função e a inclusão de variações e dados adequados são cruciais para o desempenho bem-sucedido do AG. Os parâmetros cinéticos (x) são delimitados na faixa de 0,0 a 1,0. Os mesmos são dimensionados a partir dos valores de x de acordo com uma interpolação linear entre o valor mínimo e máximo especificado de cada parâmetro cinético que está sendo otimizado.

Uma função objetivo robusta deve representar todas as variáveis de estado do modelo (Quadro 7). Um exemplo de uma possível função de aptidão para múltiplas variáveis de estado segundo Pelletier, Chapra e Tao (2006) é o inverso da RMEQ conforme apresentada na Equação (38) uma vez que o índice aumenta à medida que melhora o ajuste e o RMEQ diminui à medida que a qualidade de ajuste melhora.

$$f(x) = \left[\sum_{i=1}^q w_i \right] \left[\sum_{i=1}^q \frac{1}{w_i} \left[\frac{\frac{\sum_{j=1}^m O_{i,j}}{m}}{\left[\frac{\sum_{j=1}^m (P_{i,j} - O_{i,j})^{1/2}}{m} \right]} \right] \right] \quad (38)$$

em que: $O_{i,j}$ = valores observados; $P_{i,j}$ = valores simulados; m = número de pares de valores simulados e observados, w_i = fator de ponderação, onde é possível priorizar algumas variáveis em detrimento de outras; e q = número de parâmetros simulados.

4 MATERIAL E MÉTODOS

A metodologia foi estabelecida por cinco etapas principais. A primeira delas consistiu na caracterização da área de estudo, seguida do monitoramento da qualidade da água, da discretização e segmentação do trecho em estudo e o levantamento de dados para modelagem da qualidade da água que foram utilizados no QUAL2Kw. A última etapa foi a modelagem da qualidade da água através da calibração, feita no modelo QUAL2Kw para a simulação da qualidade da água nos cenários atuais. Os parâmetros calibrados foram: OD, DBO, pH, temperatura, Nitrogênio Orgânico e Nitrogênio Amoniacal.

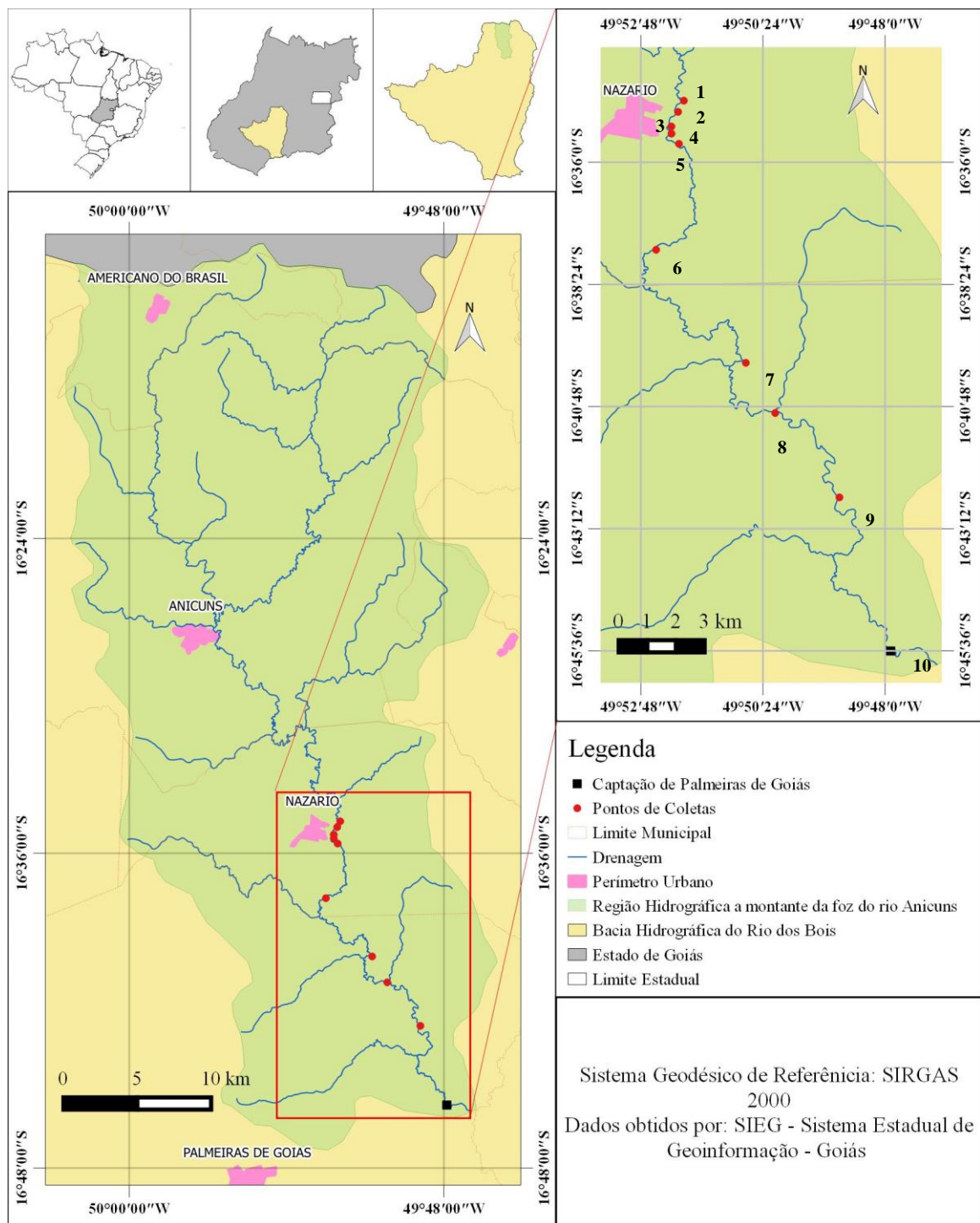
4.1 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

A área de estudo localiza-se na região central do Brasil, no estado de Goiás. O rio dos Bois, inserido na bacia do rio dos Bois, abrange 46 municípios e integra uma das quatro unidades de gestão hídrica (UGH) da Bacia do rio Paranaíba adotadas pelo Estado. O rio tem sua nascente localizada no município de Americano do Brasil/GO e deságua no rio Paranaíba.

Segundo a Ana (2013) a precipitação média anual na UGH é de 1.452 mm e caracteriza-se, segundo a classificação climática de Köppen, pelo tipo “Aw”, que corresponde ao clima tropical quente em todas as estações do ano (temperatura média mensal maior ou igual a 18° C), com inverno seco. Observa-se uma marcada sazonalidade em que os meses secos (maio a setembro) apresentam pluviosidade média mensal inferior a 50 mm, enquanto os meses úmidos (outubro a abril) apresentam média mensal superior a 100 mm, ultrapassando 250 mm nos meses de dezembro e janeiro

Na UGH na qual está o rio estudado, em relação ao uso e ocupação do solo, há predominância de agricultura e pecuária, e um dos seus principais usos é a irrigação com índice de cobertura vegetal de 15 %, segundo menor índice dentre as 11 Unidades de Planejamento e Gerenciamento de Recursos Hídricos do Estado de Goiás (UPGRHs) (SECIMA, 2015b). A Figura 11 representa a Localização da UGH Turvo e dos Bois na bacia do Paranaíba.

Figura 12 – Mapa de localização e descrição dos pontos de coleta no trecho situado a montante da foz do rio Anicuns (Elaborado pelo autor, 2016).

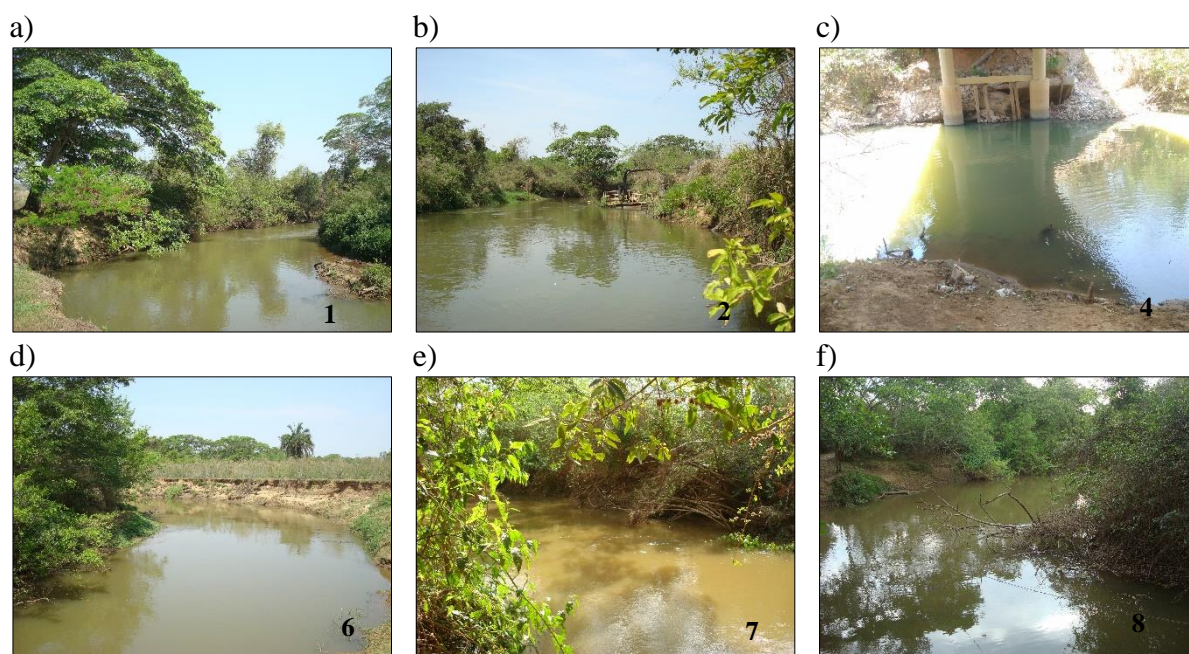


As amostras foram coletadas e preservadas conforme o Guia Nacional de Coleta e Preservação de Amostras (CETESB, 2011). No Quadro 8 estão as coordenadas de cada ponto de coleta, e na Figura 13 estão ilustrados alguns dos pontos de coletas no rio dos Bois.

Quadro 8 – Localização dos pontos de monitoramento da qualidade da água com suas devidas coordenadas geográficas.

Identificação	Latitude	Longitude
1	16°34'01,0" S	49°51'56,8" W
2	16°35'00,5" S	49°52'04,3" W
3	16°35'05,1" S	49°52'03,7" W
4	16°35'25,5" S	49°52'11,0" W
5	16°35'38,2" S	49°52'03,1" W
6	16°36'57,9" S	49°51'40,1" W
7	16°40'04,5" S	49°51'02,3" W
8	16°40'56,1" S	49°50'04,6" W
9	16°42'35,0" S	49°48'53,6" W
10	16°45'38,6" S	49°47'52,92" W

Figura 13 – Identificação de alguns pontos de monitoramento e amostragem da qualidade da água em que (a), (b), (c), (d), (e) e (f) retratam os pontos 1,2,4,6,7 e 8, respectivamente.

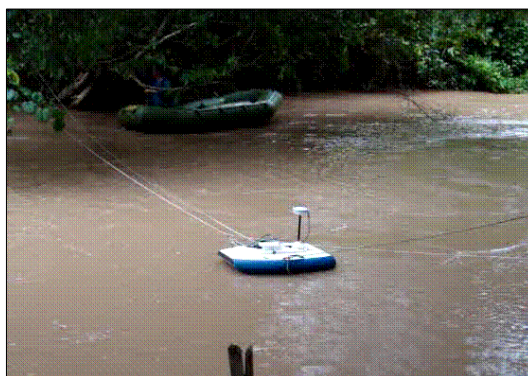


Dentre os dez pontos de coleta, foram feitas medições de vazão em cinco pontos, nos pontos 2, 4, 6, 9 e 10. por apresentarem um escoamento aproximadamente uniforme para realização da medição de velocidade, profundidade e vazão. Foram feitas quatro medidas de vazão em cada ponto, utilizando como resultado a média das medições. As vazões e velocidades médias foram obtidas utilizando o equipamento da SonTek River Surveyor ADP M9, que inclui uma espécie de sonar para medição da profundidade local, um GPS para medição da posição e um sensor de velocidade.

Este conjunto é montado em uma pequena embarcação que percorreu um trajeto perpendicular ao escoamento do leito principal. Pelo fato da embarcação com o equipamento ser pequena e

não tripulada, a embarcação era deslocada através de cordas, controlada pela equipe de trabalho, disposta em ambas as margens do rio, conforme ilustra a Figura 14.

Figura 14 – Realização de medição de vazão em um trecho do rio dos Bois utilizando o equipamento da SonTek RiverSurveyor ADP M9, sendo deslocado ao longo da seção transversal do curso d'água com auxílio de cordas controladas pela equipe de pesquisa.



As análises dos parâmetros de qualidade da água (parâmetros físico-químicos e microbiológicos) foram realizadas segundo os procedimentos do *Standard Methods* (APHA; AWWA; WEF, 2012) e as análises de metais como cálcio, cobalto, cádmio, cromo, chumbo, cobre, zinco, níquel, ferro e manganês foram realizadas segundo a norma USEPA (1992) Método 3005A. Os metais foram analisados nas campanhas amostrais de fevereiro e setembro de 2017. Os parâmetros avaliados estão dispostos no Quadro 9 contendo a unidade e a descrição do método utilizado.

Quadro 9 – Parâmetros de qualidade da água com as respectivas numerações dos métodos de acordo com o Standard Methods (2012) e USEPA (1992) (*).

Parâmetros	Unidade	Métodos	Descrição
Temperatura	°C	2550 B	Termometria
Oxigênio dissolvido	mg/L	4500-O G	Eletroquímico
Saturação	%	-	Eletroquímico
pH	-	4500-H ⁺ B	Eletrodométrico
Cor	mg PtCo/L	2120 B	Espectrofotométrico
Turbidez	NTU	2130 B	Nefelométrico
Sólidos Totais (ST)	mg/L	2540 B	Gravimétrico
Sólidos Dissolvidos Totais (SDT)	mg/L	2540 B	Gravimétrico
Sólidos Suspensos Totais (SST)	mg/L	2540 B	Gravimétrico
Nitrogênio Amoniacal	mg/L	4500-NH ₃ C	Método Titulométrico
Nitrogênio Orgânico	mg/L	4500-N _{org} B	Método Kjeldahl
Nitrogênio Total	mg/L	-	Método Kjeldahl
Nitrato	mg/L	4500-NO ₃ ⁻ B	Método de triagem espectrofotometria ultravioleta
Ortofosfato	mg/L	4500-P E	Método do ácido ascórbico
Fósforo Total (P _{Total})	mg/L	4500-P E	Método de Digestão de Persulfato
DQO	mg/L	5220-D	Método Colorimétrico de Refluxo Fechado
DBO	mg/L	5210 B	Respirométrico
Coliformes Termotolerantes (CT)	NMP/100 mL	9223 B	Substrato Cromogênico
<i>Escherichia Coli</i>	NMP/100 mL	9223 B	Substrato Cromogênico
Análises de metais (*)	mg/L ou µg/L	3005A	Espectrometria de absorção atômica por chama

Todas as análises foram realizadas em laboratório, com exceção da temperatura (°C), oxigênio dissolvido (mg/L) e a saturação (%) que foram medidos *in loco* através de um oxímetro portátil da marca Hach, modelo HQ 30d, previamente calibrado.

A análise de DBO_{5,20} consistiu em encher uma garrafa hermética com 420 mL da amostra, e incubar à temperatura de 20°C durante 5 dias. Para isto se utilizou o equipamento da marca HACH, modelo BOD Track™ II. O teor de oxigênio dissolvido foi medido no intervalo de 20 minutos, sendo programado para analisar as amostras durante um período de 10 dias.

Os sólidos totais foram determinados pelo método gravimétrico medindo-se 100 mL da amostra e submetendo-as à temperatura de 105°C por 1 hora em estufa. Após esse procedimento, transferiu-se a amostra para um dessecador por um período de tempo necessário para o resfriamento. Realizou-se a pesagem determinando-se assim a sua concentração em mg/L.

Para determinar o nitrogênio amoniacal o pH da amostra foi elevado acima de 9 com adição de hidróxido de sódio, de forma a deslocar o equilíbrio para a formação de NH₃. O NH₃ é posteriormente despendido a partir da amostra por meio de vapor de água, é destilado e

recolhido em uma solução de ácido bórico com indicador misto e a concentração de amônia no destilado é determinada por titulação com ácido sulfúrico 0,02 N.

O método Kjeldhal para determinar o nitrogênio total fundamenta-se na destruição da matéria orgânica com ácido sulfúrico concentrado, em presença de um catalisador e por ação do calor, com posterior destilação e titulação do nitrogênio proveniente da amostra transformando-o em sulfato de amônio. Em amostras onde o teor de nitrito e nitrato é desprezível, o resultado da diferença entre nitrogênio total e amoniacal é o nitrogênio orgânico.

Os valores de nitrato foram obtidos pelo método UV, no espectrofotômetro HACH DR6000, no qual adicionou-se ácido clorídrico 1N nas amostras e realizaram-se as leituras nos comprimentos de onda 220 e 275 nm.

O Ortofosfato foi determinado pelo método ácido ascórbico onde o molibdato de amônio e o tartarato de antimônio reagem em meio ácido com o ortofosfato para formar um heteropoliácido que se reduz pela ação do ácido ascórbico a azul de molibdênio de cor intensa. A leitura foi realizada em espectrofotômetro HACH DR6000 com comprimento de onda de 880nm.

A análise de DQO consistiu na oxidação da matéria orgânica e inorgânica com a solução digestora de dicromato de potássio na presença de ácido sulfúrico mais sulfato de prata. Após a digestão, em fluxo fechado, no reator HANNA HI 839800, realizou-se a leitura por colorimetria no espectrofotômetro HACH DR6000 com comprimento de onda de 600 nm.

As análises de bancada como pH, cor e turbidez foram realizadas respectivamente, com o peagâmetro portátil mPA-210p, o colorímetro AquaColor da PoliControl e o turbidímetro HACH 2100Q.

O teste de coliformes e *Escherichia coli* (*E. coli*) foi realizado pela técnica substrato cromogênico hidrolisável, que utiliza substratos cromogênicos para a detecção de enzimas de bactérias coliformes, e baseia-se na mudança de coloração para coliformes e desenvolvimento de fluorescência em lâmpada UV para *E. coli* em 100 mL da amostra, após incubação de 24 ± 2 horas à $35 \pm 0,5^\circ\text{C}$.

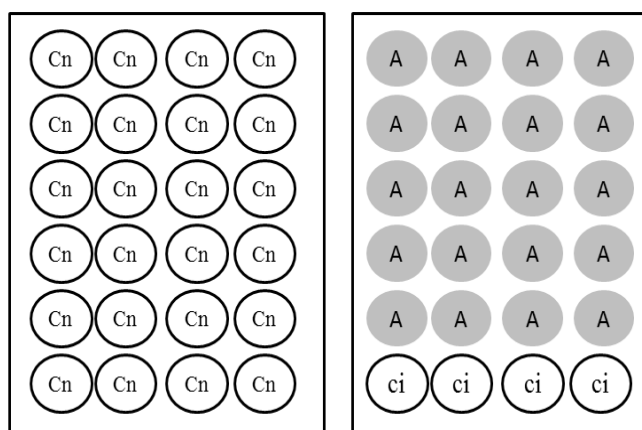
Além das análises físico-químicas e microbiológicas também foram realizados testes de toxicidade, em fevereiro e setembro de 2017, com embriões de zebrafish, de acordo com a OECD (2013), Teste nº 236 - Fish Embryo Acute Toxicity (FET) Test. O ensaio foi realizado em 3 pontos, 2, 6 e 9 em dois períodos do ano (fevereiro e setembro de 2017). O ponto 2 foi

escolhido por se localizar a montante de qualquer fonte de lançamento de efluentes, o ponto 6, por situar-se logo após todas as fontes de lançamentos de efluentes identificadas e o ponto 9, por se posicionar no final do trecho de estudo. Os peixes adultos machos e fêmeas de zebrafish (*D. rerio*) foram adquiridos em petshops e mantidos em sistema de recirculação Hydrus modelo ZEB-40 (Alesco, Monte Mor, SP, Brasil) usando água obtida por osmose reversa. A água passa por vários níveis de filtragem (filtro de carbono ativado e filtro biológico) e é então desinfetada por luz UV e os parâmetros de pH e condutividade são regulados automaticamente.

A temperatura foi mantida à $26 \pm 2^\circ\text{C}$, condutividade à $0,8 \pm 0,2$ mS, pH a $7,2 \pm 0,2$ e oxigênio dissolvido igual ou acima de 95% de saturação, com ciclo claro:escuro de 12:12h, mantido por temporizador. Os peixes adultos foram alimentados duas vezes ao dia com uma ração comercial (TetraMin Tropical Flakes®) e três vezes ao dia com organismo vivo (*A. salina*). O excesso de alimentação foi rigorosamente evitado e o restante dos alimentos e fezes foi removido diariamente para assegurar a qualidade ideal da água.

Após a seleção dos ovos fertilizados, esses foram distribuídos em placas de cultura com 24 poços, dispostos individualmente em poços com 2,0 mL de cada amostra coletada no rio dos Bois, assim como para o controle negativo (água de manutenção). Os experimentos foram realizados em triplicata e cada réplica foi constituída por 24 embriões para o controle negativo (Cn) e 20 embriões para cada amostra testada, com seu respectivo controle interno da placa (ci), como demonstra a Figura 15.

Figura 15 – Modelo do delineamento experimental do Fish Embryo Acute Toxicity (FET) Test em placas de 24 poços, onde Cn representa o controle negativo, A corresponde as amostras testadas e ci o controle interno da placa. Adaptado da OECD 236 (2013).



As placas foram incubadas à $26 \pm 1^\circ\text{C}$, em ciclo claro:escuro de 12:12h e o desenvolvimento embrio-larval foi avaliado por 96 h, utilizando um estereomicroscópio. Durante todo o ensaio

não houve adição de alimento e nem de aeração. A distinção entre o desenvolvimento normal e anormal de embriões e larvas foi estabelecida de acordo com Kimmel, C. B. *et al.* (1995) e Nagel (2002). A cada 24 horas foram avaliados os seguintes parâmetros letais: coagulação do ovo, formação dos somitos, circulação, descolamento da cauda a partir do saco vitelino. Outros parâmetros subletais foram avaliados de acordo com o desenvolvimento, como: formação do olho, pigmentação corporal, absorção do saco vitelino, alterações do líquido amniótico, eclosão, equilíbrio, deformidades da coluna vertebral e tamanho das larvas.

As análises estatísticas das três repetições foram realizadas por meio da análise de variância (ANOVA), seguido pelo pós-teste de Dunnett, utilizando o software GraphPad Prism® 5.0.

4.3 DISCRETIZAÇÃO DOS TRECHOS

Foram identificados quatro tributários de grandes proporções que foram considerados como lançamentos pontuais, sendo denominados como T1, T2, T3 e T4 intitulados respectivamente como Ribeirão Mutum, Córrego do Cavalo Morto, Córrego Grande e Córrego Santo Antônio. As localizações dos tributários podem ser observadas no Quadro 10 e na Figura 16 a seguir.

A montante do ponto 2 existe uma fonte de abstração que é a captação da indústria de fabricação de gelatina, nomeada como (CAPG), entre os pontos 3 e 4 posiciona-se as captações das indústrias de processamento do couro definidas como (CAP1) e (CAP2) e foram identificados lançamentos de efluentes oriundos das mesmas indústrias (LC1 e LC2) e entre os pontos 4 e 5 localizam-se o lançamento de resíduo de ETA (Estação de Tratamento de Água) e do efluente tratado de uma indústria de fabricação de gelatina (LRETA e LG). No decorrer do trecho de estudo não foram identificados outros pontos de captação como, por exemplo, bombeamento para irrigação, de acordo com os processos de outorgas por uso da bacia do rio Turvo e dos Bois no estado de Goiás, segundo o órgão regulamentador ambiental do Estado (SECIMA, 2018).

Como o posicionamento dos pontos de lançamentos dos efluentes são muito próximos, situados nos quilômetros 48 e 47, para fins de calibração do modelo, foi considerado um ponto de lançamento único no quilômetro 48,66 somando as cargas de lançamento de todos os efluentes, ou seja, reuniram-se os lançamentos dos dois curtumes (LC1 e LC2) com os lançamentos da indústria de gelatina (LRETA e LG). Tal ponto de lançamento foi denominado de lançamento

total dos efluentes (LTE). As localizações destes pontos podem ser contempladas no Quadro 10.

Quadro 10 – Localização dos pontos de monitoramento, das abstrações, dos lançamentos e dos tributários ao longo do trecho de 49,33 km de extensão.

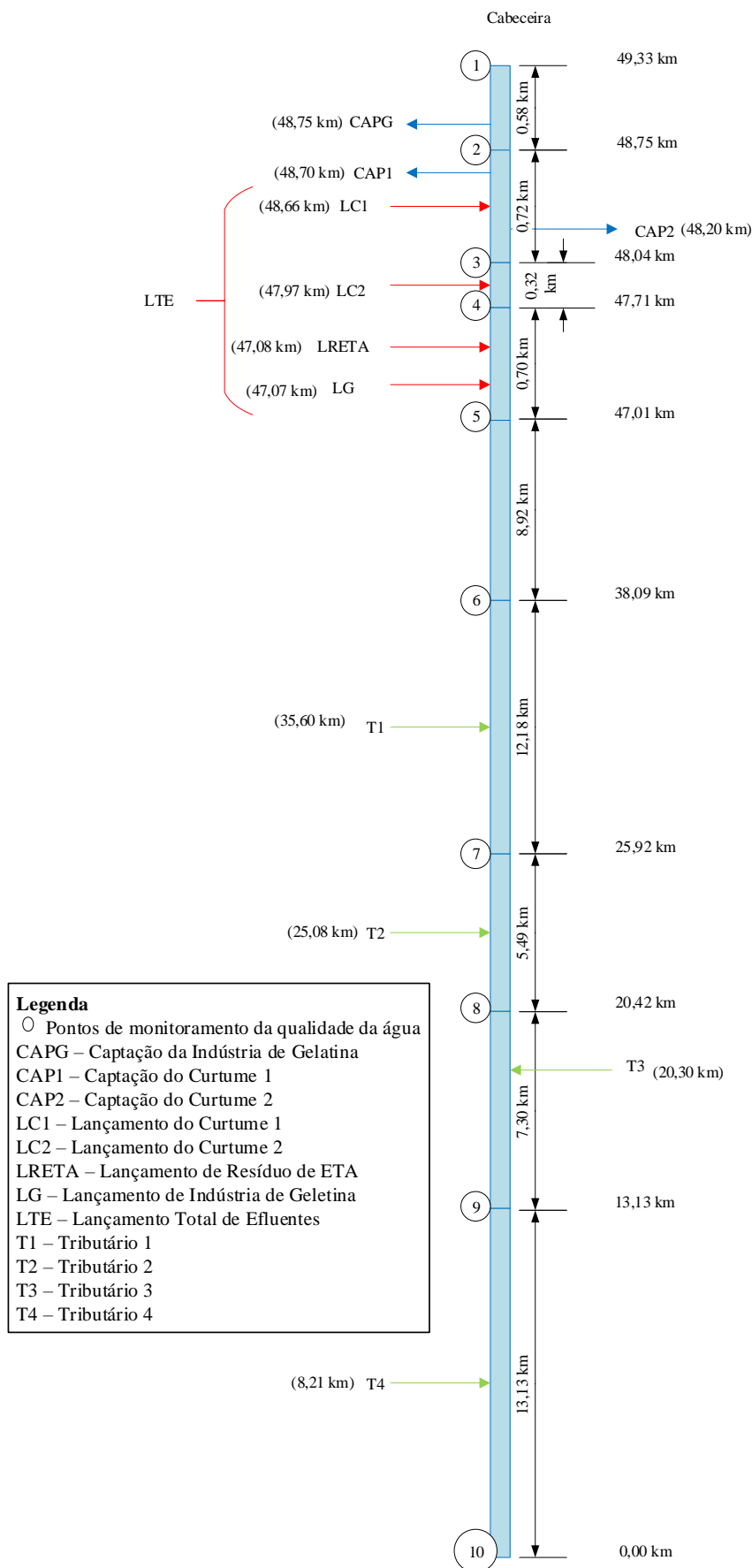
Ponto	Localização no trecho (km)
1	49.33
CAPG	48.75
2	48.75
CAP1	48.70
3	48.04
LC1	48.66
CAP2	48.20
LC2	47.97
4	47.71
LRETA	47,08
LG	47.07
D5	47.01
6	38.09
T1	35.60
7	25.92
T2	25.08
8	20.42
T3	20.30
9	13.13
T4	8.21
10	0.00

Esse corpo hídrico foi segmentado em 9 trechos com distâncias distintas, totalizando 49,33 km de extensão como pode ser observado na Figura 16 e no Quadro 11, que apresentam o diagrama unifilar do rio principal e as extensões de cada trecho, respectivamente. Observa-se que a cabeceira coincide com o ponto de monitoramento 1 e também são representadas todas as fontes pontuais, desde abstrações até lançamentos com suas respectivas localizações no curso do rio principal.

Quadro 11 – Divisão dos trechos em ordem decrescente, a partir da extensão total de 43,33 km até zerar.

Trecho	Extensão do trecho (km)	Início do trecho (km)	Final do trecho (km)
Trecho 1	0,58	49,33	48,75
Trecho 2	0,72	48,75	48,04
Trecho 3	0,32	48,04	47,71
Trecho 4	0,70	47,71	47,01
Trecho 5	8,92	47,01	38,09
Trecho 6	12,18	38,09	25,92
Trecho 7	5,49	25,92	20,42
Trecho 8	7,30	20,42	13,13
Trecho 9	13,13	13,13	0,00

Figura 16 – Segmentação dos trechos entre os pontos de monitoramento com as abstrações e lançamentos.

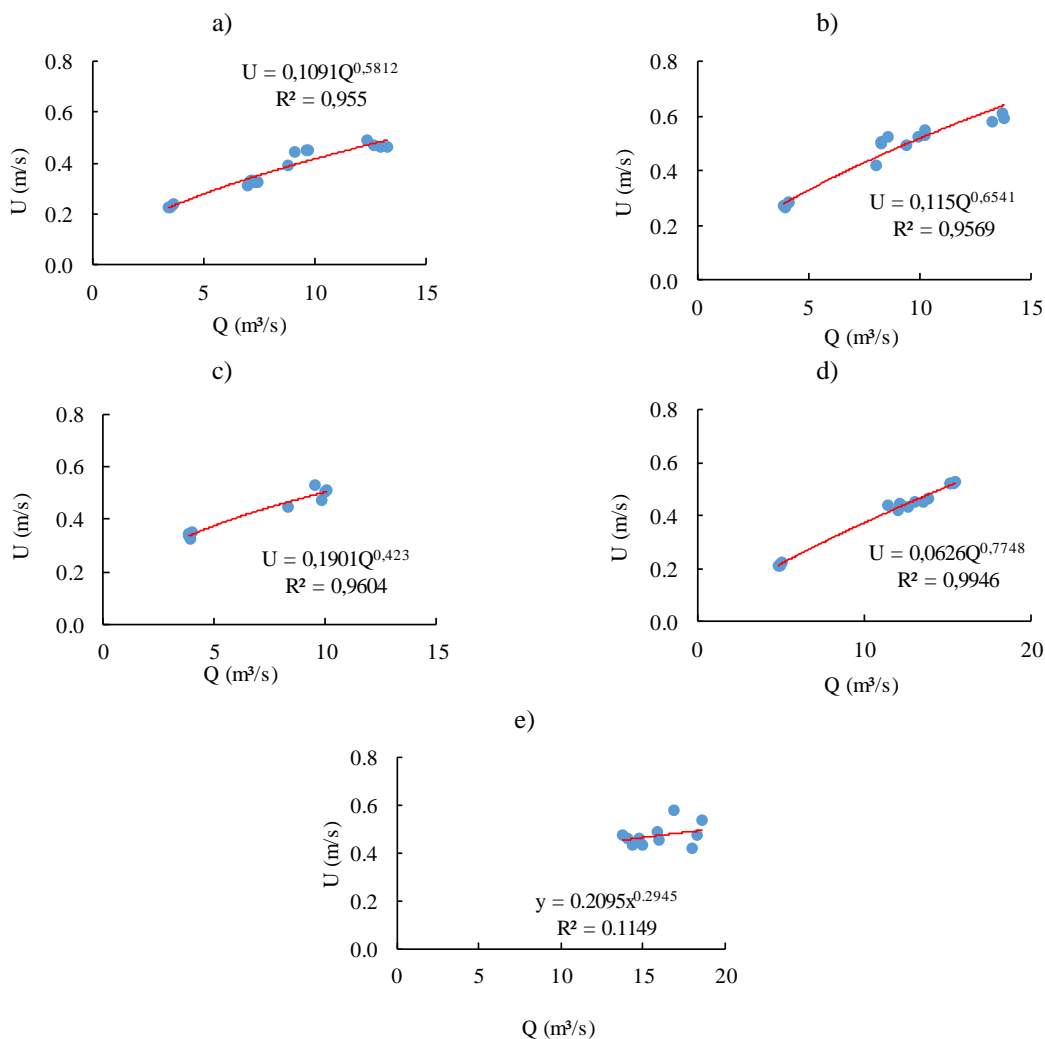


4.4 OBTENÇÃO DOS DADOS DE ENTRADA

◆ Características Hidráulicas

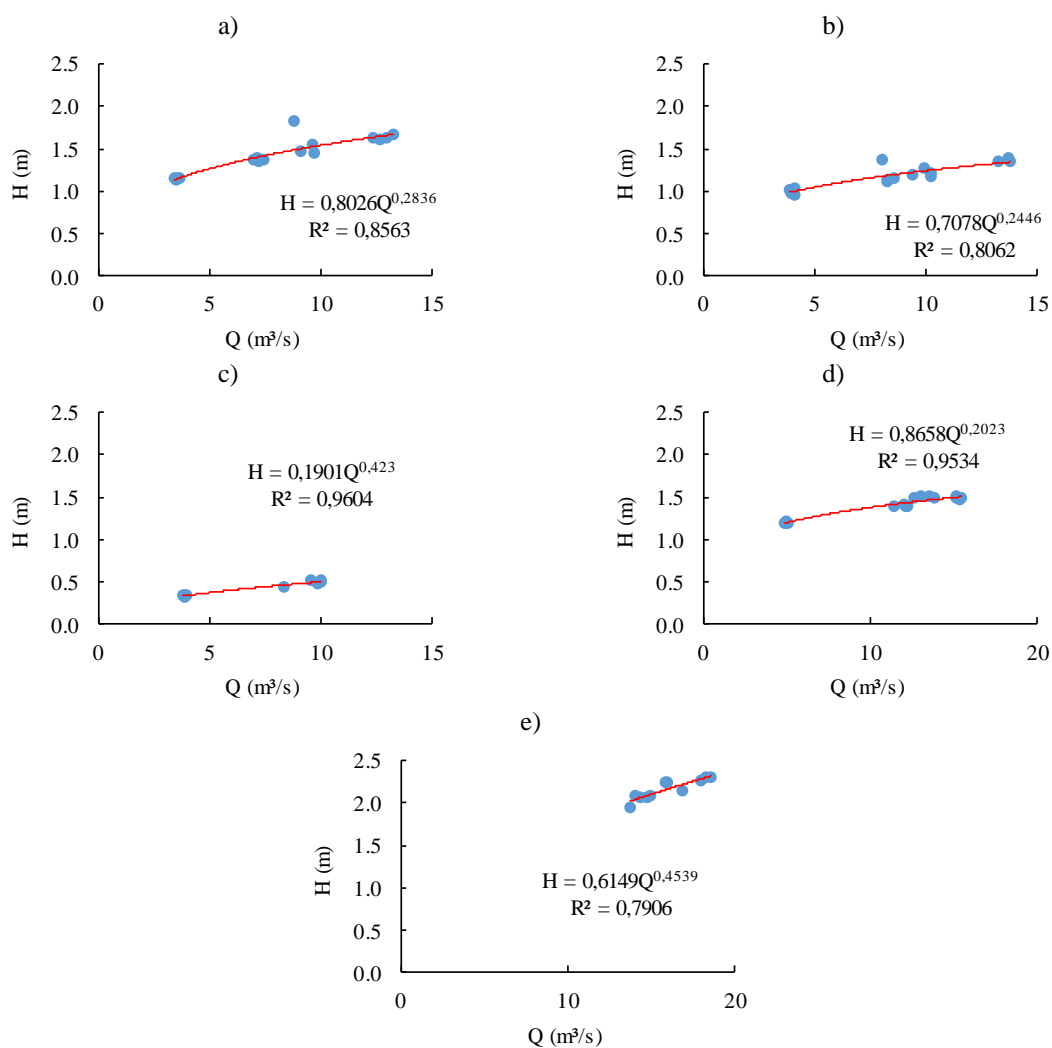
As características hidráulicas para a modelagem foram obtidas através das curvas-chave para originar os coeficientes de descarga em relação a velocidade e profundidade do corpo hídrico utilizando as equações potenciais (Equações (25) e (26)), que relacionam velocidade média e profundidade em função da vazão. Foram utilizados os dados obtidos durante as coletas de outubro e novembro de 2015, e janeiro e março de 2016 nos pontos de monitoramento 2, 4, 6, 9 e 10. Essa etapa foi realizada no Excel e as equações obtidas para os respectivos pontos de monitoramento podem ser observadas nos gráficos que relacionam a velocidade em função da vazão dos pontos 2 (a), 4 (b), 6 (c), 9 (d) e 10(e), na Figura 17, e a profundidade em função da vazão dos pontos 2 (a), 4 (b), 6 (c), 9 (d) e 10(e) na Figura 18.

Figura 17 – Gráfico para determinação dos coeficientes de descarga da velocidade (U) em função da vazão (Q) dos pontos 2 (a), 4 (b), 6 (c), 9 (d) e 10(e).



Observando os coeficientes de determinação (R^2) da Figura 17, pode-se constatar uma correlação muito forte nos pontos 2 (a), 4 (b) 6 (c) e 9 (d) e uma má representatividade do modelo no ponto 10, Figura 17e, onde o coeficiente de determinação possui um valor de correlação desprezível considerando a escala de interpretação de Pearson, em que, valores do coeficiente acima de 0,9 indica uma correlação muito forte, de 0,7 a 0,9 indica uma correlação forte, 0,5 a 0,7 indica uma correlação moderada, 0,3 a 0,5 indica uma correlação fraca, 0 a 0,3 indica uma correlação desprezível.

Figura 18 – Gráfico para determinação dos coeficientes de descarga da profundidade (H) em função da vazão (Q) dos pontos 2 (a), 4 (b), 6 (c), 9 (d) e 10(e).



Observando os coeficientes de determinação (R^2) da Figura 18, pode-se constatar uma correlação forte nos pontos 2, 4, uma correlação muito forte nos pontos 6 e 9 e uma correlação forte no ponto 10, Figura 18e.

Os expoentes e coeficientes foram calculados para todos os trechos que foram definidos no QUAL2Kw e os valores obtidos para cada trecho estão descritos na Tabela 3.

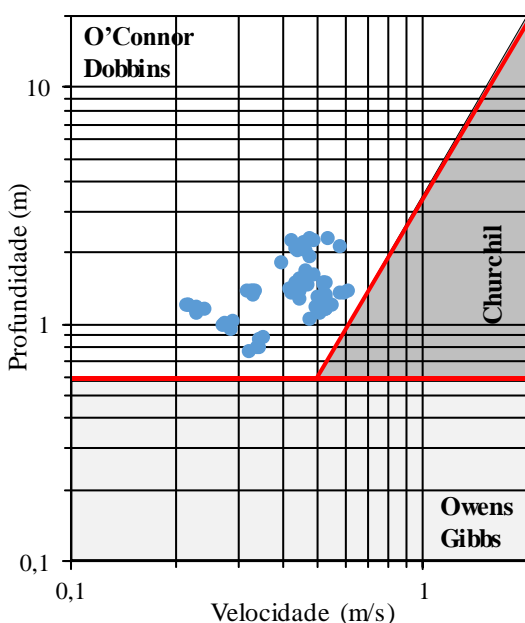
Tabela 3 – Coeficientes de descargas para cada trecho do rio dos Bois.

Trecho	Coeficientes de descarga			
	Velocidade (U)		Profundidade (H)	
	Coefficiente a	Expoente b	Coefficiente α	Expoente β
1	0,11	0,58	0,81	0,28
2	0,13	0,60	0,70	0,25
3	0,13	0,60	0,70	0,25
4	0,19	0,43	0,46	0,43
5	0,19	0,43	0,46	0,43
6	0,06	0,77	0,87	0,20
7	0,06	0,77	0,87	0,20
8	0,20	0,32	0,63	0,45
9	0,20	0,32	0,63	0,45

◆ Reaeração

Os coeficientes de reaeração K_2 foram calculados para cada trecho do rio de acordo com os valores de profundidade e velocidade obtidos, onde se observa que os resultados permitem a aplicação da fórmula de O’Connor e Dobbins, não sendo possível Churchill e Owells Gibbs, segundo Covar (1976) adaptado por Chapra et al. (2012) como apresentado na Figura 19.

Figura 19 – Faixa do coeficiente de reaeração (d^{-1}) do rio dos Bois em função da profundidade e velocidade do curso d’água segundo Covar (1976) adaptado por Chapra et al (2012).



Dessa forma, aplicou-se a equação de O'Connor e Dobbins (1958), apresentada no Quadro 2, utilizando os valores de velocidade e profundidade através das 4 medições por ponto, obtidos no rio dos Bois, sendo possível obter os valores de U, H e K_2 com o respectivo desvio padrão, para os cinco pontos no trecho estudado, com exceção do ponto 10 no mês de outubro de 2015 e o ponto 6 no mês de janeiro de 2016, devido à não acessibilidade ao ponto no dia da campanha amostral (Tabela 4).

Tabela 4 – Valores de K_2 em função da velocidade e profundidade, distribuídos em 5 pontos de coletas nos meses de out./15, nov./15, jan./16 e mar./16.

Ponto de coleta	Mês/ano					
	out/15			nov/15		
	U (m.s ⁻¹)	H (m)	K ₂ (d ⁻¹)	U (m.s ⁻¹)	H (m)	K ₂ (d ⁻¹)
2	0,23±0,01	1,15±0,02	1,53±0,01	0,43±0,03	1,58±0,17	1,31±0,15
4	0,28±0,01	1,00±0,04	2,08±0,03	0,52±0,02	1,21±0,04	2,14±0,03
6	0,34±0,01	0,83±0,05	3,05±0,02	0,51±0,02	1,220,12	2,06±0,06
9	0,22±0,01	1,20±0,01	1,40±0,01	0,45±0,01	1,50±0,01	1,44±0,01
10	-	-	-	0,50±0,07	2,26±0,08	0,82±0,13

Ponto de coleta	Mês/ano					
	jan/16			mar/16		
	U (m.s ⁻¹)	H (m)	K ₂ (d ⁻¹)	U (m.s ⁻¹)	H (m)	K ₂ (d ⁻¹)
2	0,47±0,01	1,64±0,03	1,29±0,02	0,33±0,01	1,38±0,02	1,39±0,02
4	0,60±0,02	1,37±0,02	1,89±0,01	0,49±0,05	1,20±0,12	2,09±0,10
6	-	-	-	0,45±0,00	1,27±0,00	1,84±0,00
9	0,52±0,00	1,49±0,01	1,56±0,01	0,44±0,01	1,40±0,01	1,57±0,01
10	0,46±0,03	2,19±0,09	0,82±0,05	0,46±0,05	2,04±0,07	0,91±0,07

Nota: - Não foi possível acesso ao ponto no dia da campanha amostral.

◆ Constantes da nitrificação

Os coeficientes que integram o fenômeno da nitrificação foram calibrados em uma planilha a parte, utilizando a ferramenta Solver do Microsoft Excel, e depois inseridos no modelo QUAL2Kw na planilha “Reach Rates”. Para tanto, utilizou-se as Equações (16), (17) e (18) para simular a concentração de nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal e nitrato com valores aleatórios das constantes juntamente com o conjunto de dados de cada campanha amostral. Para os coeficientes R_{O_2amon} foi admitido o valor de 4,3 mgO₂/mgN_{amon} e para K_{nitrOD} o valor de 0,6 L/mg. Os dados de entrada utilizados para a calibração estão dispostos na Tabela 5, Tabela 6, Tabela 7 e Tabela 8 para os meses de outubro de 2015, novembro de 2015, janeiro de 2016 e março de 2016, respectivamente.

Tabela 5 – Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de outubro de 2015.

Ponto	Distância(km)	OD (mg/L)	DBOu (mg/L)	Norg (mg/L)	NH ₄ (mg/L)
1	0.00	6.76	1.65	0.15	0.48
2	13.13	6.74	1.81	0.25	0.28
3	20.42	6.78	1.81	0.20	0.22
4	25.92	6.86	1.07	0.34	0.45
5	38.09	6.85	2.47	0.39	0.39
6	47.01	5.69	7.75	1.48	0.31
7	47.71	5.07	8.66	0.70	0.25
8	48.04	4.86	7.17	0.20	0.36
9	48.75	4.56	4.53	0.17	0.45

Tabela 6 – Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de novembro de 2015.

Ponto	Distância (km)	OD (mg/L)	DBOu (mg/L)	Norg mg/L)	NH ₄ (mg/L)
1	0.00	6.58	1.73	0.39	0.17
2	13.13	6.54	2.23	0.64	0.08
3	20.42	6.55	3.63	0.59	0.08
4	25.92	6.41	3.22	0.70	0.20
5	38.09	6.43	4.20	0.34	0.22
6	47.01	5.86	6.51	0.92	0.20
9	48.75	5.40	3.63	0.45	0.112
10	49.33	4.88	4.45	0.64	0.084

Tabela 7 – Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de janeiro de 2016.

Ponto	Distância (km)	OD (mg/L)	DBOu (mg/L)	Norg (mg/L)	NH ₄ (mg/L)
1	0.00	6.74	3.30	0.03	0.22
2	13.13	6.80	2.97	0.17	0.11
3	20.42	6.79	4.37	0.20	0.17
4	25.92	6.79	5.19	0.25	0.20
5	38.09	6.72	6.27	0.17	0.25
6	47.01	6.01	11.21	0.08	0.25
7	47.71	5.41	5.36	0.20	0.25
9	48.75	5.52	4.20	0.11	0.224
10	49.33	5.40	2.97	0.17	0.252

Tabela 8 – Dados de entrada para calibração do modelo de nitrogênio para o mês de março de 2016.

Ponto	Distância (km)	OD (mg/L)	DBOu (mg/L)	Norg (mg/L)	NH ₄ (mg/L)
1	0.00	6.61	1.24	0.11	0.00
2	13.13	6.45	2.72	0.28	0.00
3	20.42	6.42	3.30	0.07	0.10
4	25.92	6.47	8.57	0.28	0.06
5	38.09	6.36	5.36	0.42	0.08
6	47.01	5.47	4.95	0.22	0.17
9	48.75	5.59	2.39	0.34	*
10	49.33	5.54	0.99	0.41	0.10

Nota: * erro de análise.

Por conseguinte, realizou-se a otimização das células das constantes através da minimização do erro entre os valores observados e os valores simulados. O erro foi calculado a partir do quadrado da diferença dos valores observados com os valores estimados pela simulação. Após

a calibração das constantes foi obtido como resultado os valores e erros representados pela Tabela 9 para cada campanha amostral.

Tabela 9 – Resultado da calibração da constante de conversão de nitrogênio orgânico à amoniacal (Koa) e da constante de conversão de nitrogênio amoniacal diretamente para nitrato (Kan) e seus respectivos erros.

Meses/ano	Koa	Erro	Kan	Erro
out/15	0.25	2.4743	0.20	0.0702
nov/15	0.20	0.3124	0.77	0.0242
jan/16	0.20	0.0372	1.00	0.0951
mar/16	0.25	0.1490	1.00	0.0309

4.5 CÁLCULO DA ZONA DE MISTURA

O cálculo da distância do lançamento até o ponto de mistura lateral total foi realizado na seção do rio após o lançamento de efluentes (ponto 4), considerando o lançamento dos esgotos em uma margem. Foi utilizado o método de Yotsukura citado por Thomann e Mueller (1987) de acordo com a Equação (39).

$$L_m = 8,7 v \frac{B^2}{H} \quad (39)$$

em que, L_m = distância do ponto de lançamento até o ponto em que a descarga tenha sido bem misturada lateralmente (m), v = velocidade do rio (m/s), B = largura média do rio (m) e H = profundidade média do rio (m).

Usualmente se considera nos modelos que esta distância é pequena, comparada com a distância total a ser estudada. Aplicou-se então a Equação (39) para os dados de entrada da Tabela 10 obtidos no ato da medição de vazão, referentes ao ponto 4.

Tabela 10 - Dados da seção do rio referentes ao ponto 4 para os meses de outubro e novembro de 2015 e janeiro de março de 2016.

Parâmetro	Meses/ano			
	out/15	nov/15	jan/16	mar/16
v	0.28	0.52	0.60	0.49
B	14.52	15.70	16.69	14.24
H	0.80	0.75	0.95	0.92

Obteve-se como resultado a distância de percurso para se atingir a mistura total o valor médio de $1,5 \pm 0,43$ km, referente às quatro campanhas amostrais.

4.6 CONFIGURAÇÃO DO MODELO QUAL2KW

O tempo de cálculo assumido foi de 5,625 minutos usando o método de integração de Runge-Kutta. Foram adotados 15 dias repetidos de simulações e o método de solução adotado para o pH foi o de Newton-Raphson. Não foi considerada a diagênese do sedimento e a simulação da zona hiporreica.

No modelo hidráulico do QUAL2Kw (aba “REACH”) foram lançados os coeficientes de descarga α , β , a e b de cada uma das seções em estudo, como observou-se na Tabela 3. Na aba “REACH RATES” foram inseridos os valores de K_2 obtidos nas campanhas amostrais de outubro e novembro de 2015 e fevereiro e março de 2016, para serem calibrados pelo modelo. Na mesma aba se inseriu os valores de $K_1 = 0,10$ para todos os segmentos do trecho de acordo com o Quadro 1, onde temos os valores usuais dessa constante para cursos d’água com águas limpas variando de 0,08 a 0,20 (VON SPERLING, 2014). Também foram inseridas as constantes de conversão de nitrogênio orgânico à amoniacal (K_{oa}) e a conversão de nitrogênio amoniacal diretamente para nitrato (K_{an}), calibradas para cada campanha amostral, como demonstra a Tabela 9.

A DBO medida nas análises foi a DBO de 5 dias, que deve ser transformada em DBO última ao serem inseridas no modelo para o cômputo da $DBOC_{fast}$. Para isso, utilizou-se a Equação (40) para a transformação dos valores analisados. A $DBOC_{slow}$ foi considerada nula.

$$DBOC_u = \frac{DBOC_5}{1 - e^{-K_1 5}} \quad (40)$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 CALIBRAÇÃO DO MODELO

A calibração do modelo foi realizada pelo algoritmo genético, sendo utilizadas 100 gerações e 100 simulações dentro de uma mesma população, uma vez que o acréscimo destes parâmetros não resulta em ganhos sensíveis na qualidade do ajuste (PELLETIER; CHAPRA; TAO, 2006). Os demais parâmetros utilizados no PIKAIA foram valores definidos como padrão pelo modelo.

Após a autocalibração, foram estimadas as concentrações das cargas de nutrientes dos lançamentos dos efluentes totais de forma a obter o melhor valor para o inverso do RMEQ de cada campanha amostral. A reaeração foi simulada pela forma interna no modelo, onde o método é selecionado conforme relações de profundidade e velocidade.

Foram realizadas calibrações para os meses de outubro e novembro de 2015 e para os meses de janeiro e março de 2016, distintamente, utilizando os dados coletados para cada campanha amostral, resultando em 4 modelos calibrados. O inverso do RMEQ obtido pela autocalibração foi de 0,8055 para o mês de outubro de 2015, 0,8153 para o mês de novembro de 2015, 0,8026 para o mês de janeiro de 2016 e 0,8080 para o mês de março de 2016.

Para a calibração do mês de outubro de 2015, foram utilizados os dados observados da campanha amostral do dia 09/10/2015 que constam na Tabela 11.

Tabela 11 – Dados observados em campo do mês de outubro de 2015 para calibração no modelo QUAL2Kw.

Ponto	Distância de Jusante (km)	T (° C)	pH	OD (mgO ₂ /L)	DBOC _{fast} (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	Q (m ³ /s)	H (m)	U (m/s)
1	49,33	26,97	6,80	6,76	1,65	154,00	476,00	-	-	-
2	48,75	27,03	6,90	6,74	1,81	252,00	280,00	3,56	1,03	0,23
3	48,04	27,07	7,00	6,78	1,81	196,00	224,00	-	-	-
4	47,71	27,30	7,10	6,86	1,07	336,00	448,00	4,04	0,80	0,28
5	47,01	27,30	7,20	6,85	2,47	392,00	392,00	-	-	-
6	38,09	28,67	7,30	5,69	7,75	1484,00	308,00	3,91	0,64	0,34
7	25,92	29,13	7,10	5,07	8,66	700,00	252,00	4,44	0,56	0,44
8	20,42	28,70	7,20	4,86	7,17	196,00	364,00	4,89	0,95	0,23
9	13,13	28,50	7,20	4,56	4,53	168,00	448,00	5,00	1,08	0,22

Os dados de entrada das cargas pontuais identificadas no trecho de estudo foram inseridos na aba “Point Sources”, onde deve-se mencionar a localização do lançamento no trecho, a vazão e

os respectivos dados de qualidade para cada fonte. Os valores usados neste estudo para a calibração do modelo no mês de outubro de 2015, estão representados na Tabela 12.

As vazões dos tributários foram estimadas através do balanço das entradas e saídas entre as vazões medidas nos pontos de coleta. As vazões de captação foram obtidas através das outorgas disponíveis no órgão ambiental competente (SECIMA, 2018). A vazão do LTE foi estimada e fixada para todos os meses e as concentrações das cargas foram estimadas para cada campanha amostral de forma a obter o melhor ajuste, bem como os valores de OD, DBO e pH e temperatura dos tributários.

Tabela 12 – Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de outubro de 2015.

Fonte Pontual	Localização (km)	Q (m ³ /s)	T (°C)	OD (mgO ₂ /L)	DBO (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	pH
CAPG	48,75	0,056	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CAP1	48,70	0,042	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
LTE	48,66	0,138	28,00	1,00	300,00	90000,00	50,00	7,00
CAP2	48,20	0,014	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
T 1	35,60	0,530	28,00	6,80	1,00	0,00	0,00	7,00
T 2	25,08	0,450	28,00	6,80	1,00	0,00	0,00	7,00
T 3	20,30	0,110	28,00	6,80	1,00	0,00	0,00	7,00
T 4	8,21	0,802	28,00	6,80	1,00	0,00	0,00	7,00

Nota: Q = Vazão (m³/s), T = temperatura (°C), OD = oxigênio dissolvido (mgO₂/L), Norg = nitrogênio orgânico (µgN/L), NH₄ = nitrogênio amoniacal.

Nas Figuras 20 a 25 constam os resultados da calibração para as variáveis de qualidade da água OD, DBO, pH, Temperatura, Norg e NH₄ para o mês de outubro de 2015. O ponto do lançamento total de efluentes está identificado como LTE.

Figura 20 – Resultado da calibração para OD no mês de outubro de 2015.

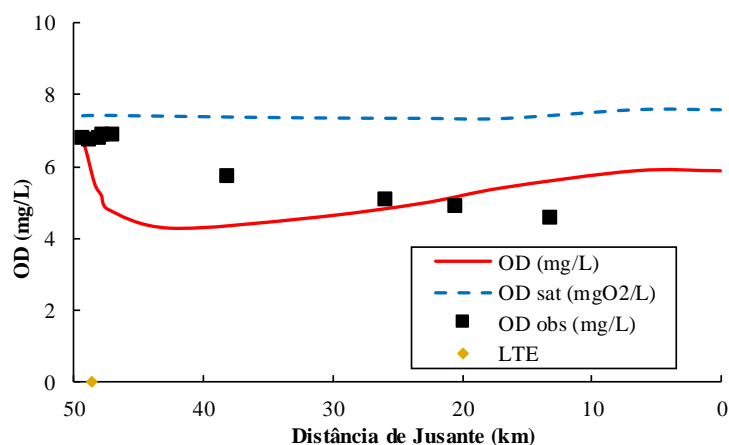


Figura 21 – Resultado da calibração para DBO no mês de outubro de 2015.

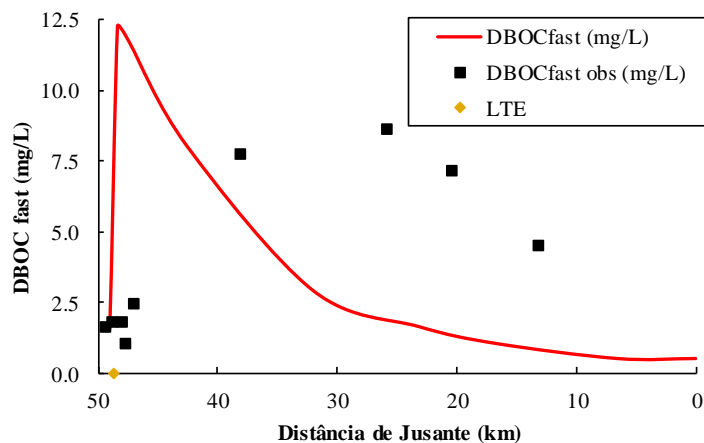


Figura 22 – Resultado da calibração para o pH no mês de outubro de 2015.

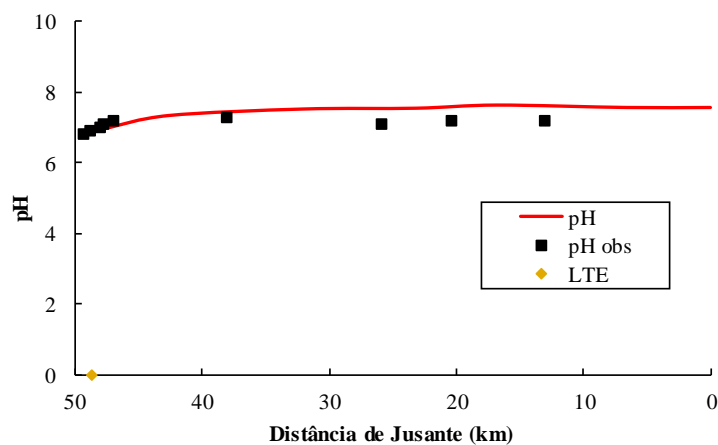


Figura 23 – Resultado da calibração para a Temperatura no mês de outubro de 2015.

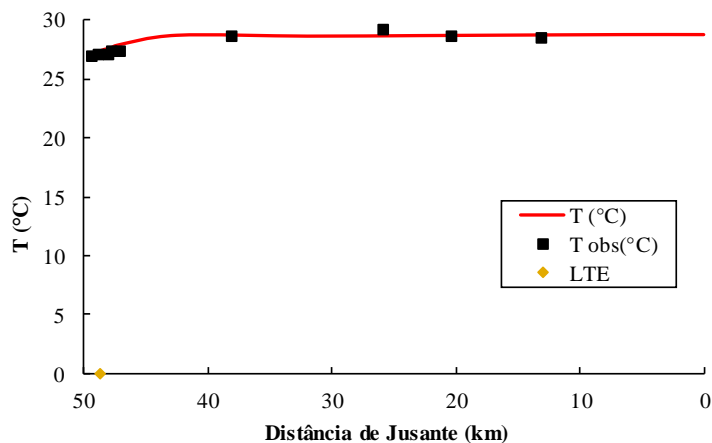


Figura 24 – Resultado da calibração para o Norg no mês de outubro de 2015.

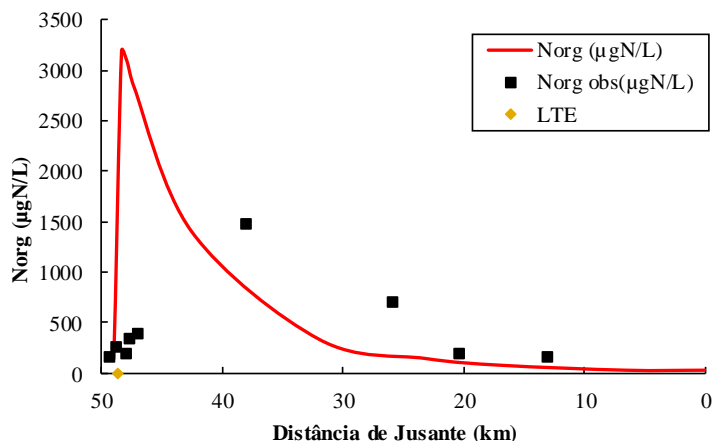
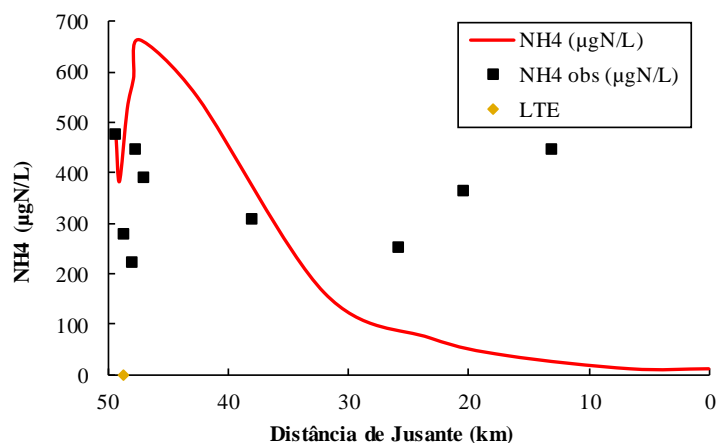


Figura 25 – Resultado da calibração para NH₄ no mês de outubro de 2015.



Os resultados da calibração do mês de outubro de 2015, observados nas Figura 20 a Figura 25, tiveram um bom ajuste quando comparadas aos valores observados, com valor do inverso da RMEQ de 0,8055. Em relação ao OD (Figura 20), o modelo simula concentrações que atinge um valor de 4,40 mg/L, e permanece abaixo de 5mg/L cerca de 24 km de extensão do trecho. A concentração de OD possui um comportamento diferente em relação aos outros meses, e em relação aos dados medidos, pois simula a partir do km 20, a zona de recuperação das concentrações de OD enquanto os dados ainda decaem.

A DBO simulada (Figura 21) atinge um valor máximo de 12,25 mg/L logo após o ponto de lançamento LTE, e permanece acima de 5 mg/L durante 5 km de extensão longitudinal do rio. Da mesma forma do OD, os dados medidos em campo possuem um comportamento atípico, onde não ocorre um decaimento exponencial dos valores. Esse comportamento pode ser justificado pela existência de contribuições difusas, que não foram consideradas na simulação e que podem estar contribuindo para o decaimento dos dados de OD e aumento dos dados de DBO em campo.

Os valores de pH e temperatura (Figura 22 e Figura 23) estiveram constantes e dentro dos valores padrões. O Norg (Figura 24) não possui limite padrão recomendado pela CONAMA 357/2005 e possui um bom ajuste visual dos dados medidos em campo com os dados simulados. Já o NH_4 (Figura 25) manteve-se acima de 500 $\mu\text{g/L}$, atingindo um valor máximo simulado de 664,59 $\mu\text{g/L}$, no mesmo trecho em que a DBO também esteve em desacordo com a legislação, segundo o Decreto nº1745/79. Os valores de NH_4 medidos em campo apresentam uma concentração inicial alta, decai e começa a aumentar de novo no meio do trecho, não condizendo com o comportamento dos outros meses, que permanecem constantes ou vão decaindo até o final do trecho.

Para a calibração do mês de novembro de 2015, foram utilizados os dados observados na campanha amostral do dia 20/11/2015 que constam na Tabela 13.

Tabela 13 – Dados observados em campo do mês de novembro de 2015 para calibração no modelo QUAL2Kw.

Ponto	Distância de Jusante (km)	T (° C)	pH	OD (mgO ₂ /L)	DBOC _{fast} (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	Q (m ³ /s)	H (m)	U (m/s)
1	49,33	25,87	8,56	6,58	1,73	392,00	168,00	-	-	-
2	48,75	25,88	8,47	6,54	2,23	644,00	84,00	9,33	1,35	0,433
3	48,04	25,75	8,30	6,55	3,63	588,00	84,00	-	-	-
4	47,71	26,73	8,39	6,41	3,22	700,00	196,00	9,95	0,75	0,524
5	47,01	26,17	8,42	6,43	4,20	336,00	224,00	-	-	-
6	38,09	27,47	8,41	5,86	6,51	924,00	196,00	9,86	0,92	0,506
9	13,13	25,98	8,25	5,40	3,63	448,00	112,00	13,27	1,37	0,451
10	0,00	26,09	8,06	4,88	4,45	644,00	84,00	17,99	1,93	0,504

Os dados de entrada das cargas pontuais inseridos na aba “Point Sources”, usados para a calibração do modelo no mês de novembro de 2015, estão representados na Tabela 14.

As vazões dos tributários também foram estimadas através do balanço das entradas e saídas entre as vazões medidas nos pontos de coleta e através do incremento em relação a outubro de 2015. As concentrações das cargas do LTE foram estimadas de forma a obter o melhor ajuste, assim como em outubro de 2015 e para os demais meses, bem como os valores de OD, DBO e pH e temperatura dos tributários.

Tabela 14 – Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de novembro de 2015.

Fonte Pontual	Localização (km)	Q (m ³ /s)	T (°C)	OD (mgO ₂ /L)	DBO (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	pH
CAPG	48,75	0,056	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CAP1	48,70	0,042	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
LTE	48,66	0,138	26,00	2,00	600,00	80000,00	300,00	8,00
CAP2	48,20	0,014	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
T 1	35,60	1,337	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,50
T 2	25,08	1,135	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,50
T 3	20,30	0,939	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,50
T 4	8,21	4,720	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,50

Nas Figuras 26 a 31 constam os resultados da calibração para as variáveis de qualidade da água OD, DBO, pH, Temperatura, Norg e NH₄ para o mês de novembro de 2015.

Figura 26 – Resultado da calibração para OD no mês de novembro de 2015.

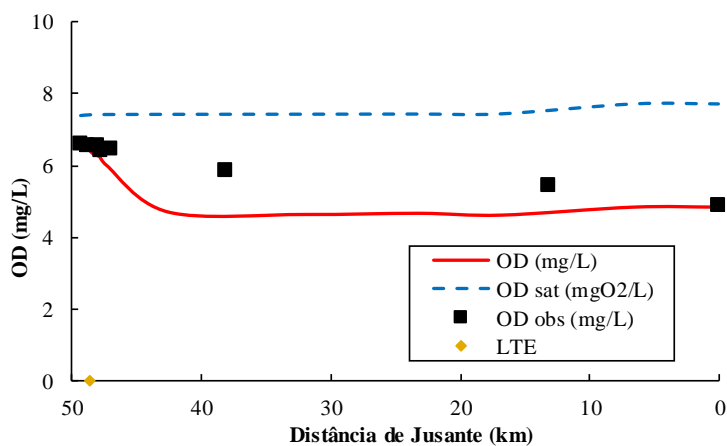


Figura 27 – Resultado da calibração para DBO no mês de novembro de 2015.

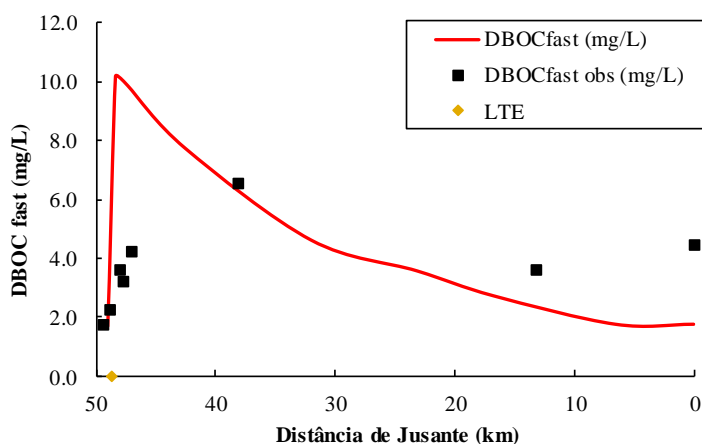


Figura 28 – Resultado da calibração para o pH no mês de novembro de 2015.

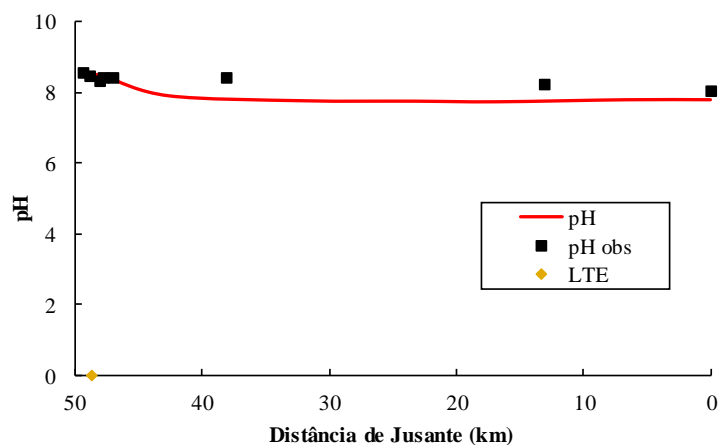


Figura 29 – Resultado da calibração para a Temperatura no mês de novembro de 2015.

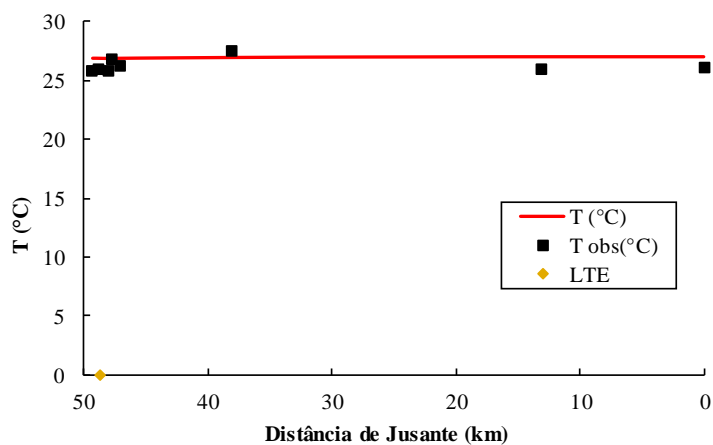


Figura 30 – Resultado da calibração para o Norg no mês de novembro de 2015.

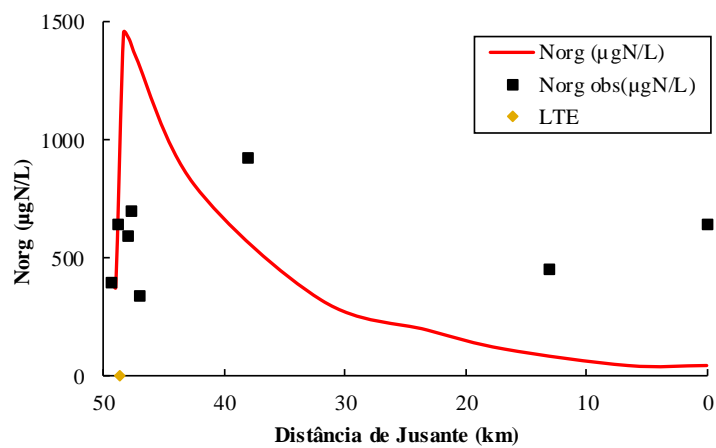
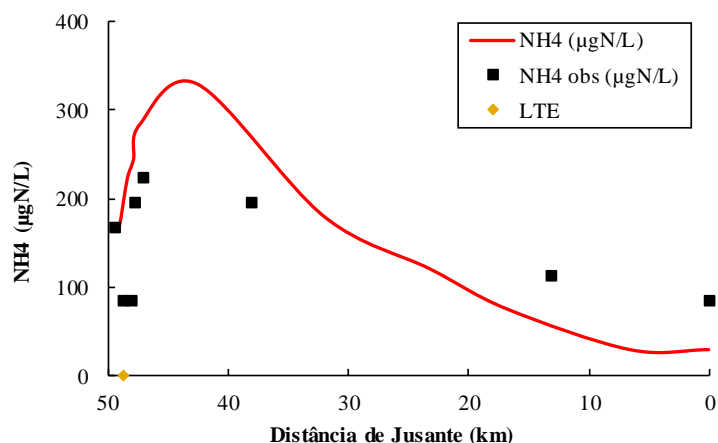


Figura 31 – Resultado da calibração para o NH₄ no mês de novembro de 2015.

Em novembro de 2015, os resultados das calibrações constam nas Figuras 26 a 31 alcançando o valor de 0,8153 como inverso da RMEQ para avaliar o ajuste do modelo. As concentrações simuladas de OD (Figura 26) apresentam-se abaixo dos padrões recomendados atingindo um valor mínimo de 4,65 mg/l no quilômetro 32. A simulação manteve-se abaixo das concentrações medidas em campo. Esse comportamento pode ser justificado pelo processo de reaeração em campo estar mais alto do que o simulado pelo modelo, uma vez que o K_2 é determinante nas concentrações de OD.

A DBO (Figura 27) atinge seu pico em 10,19 mg/l, após o ponto de LTE e continua acima do padrão recomendado por 5,84 km de extensão seguindo a tendência dos dados observados em campo. Os demais parâmetros estão dentro dos valores recomendados pela legislação vigente, mas a tendência dos dados observados de Norg aumentam a partir do km 25, enquanto aos do modelo decaem (Figura 30).

Para a calibração do mês de janeiro de 2016, foram utilizados os dados observados da campanha amostral do dia 12/01/2016 que constam na Tabela 15.

Tabela 15 – Dados observados em campo do mês de janeiro de 2016 para calibração no modelo QUAL2Kw.

Ponto	Distância de Jusante (km)	T (° C)	pH	OD (mgO ₂ /L)	DBOC _{fast} (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	Q (m ³ /s)	H (m)	U (m/s)
1	49,33	26.73	7.10	6.74	3.30	28.00	224.00	-	-	-
2	48,75	26.27	7.48	6.80	2.97	168.00	112.00	12,84	1,36	0,471
3	48,04	26.00	7.68	6.79	4.37	196.00	168.00	-	-	-
4	47,71	26.03	7.81	6.79	5.19	252.00	196.00	13,60	0,95	0,595
5	47,01	26.33	7.03	6.72	6.27	168.00	252.00	-	-	-
6	38,09	26.37	7.98	6.01	11.21	84.00	252.00	-	-	-
7	25,92	26.30	7.95	5.41	5.36	196.00	252.00	-	-	-
9	13,13	26.07	8.15	5.52	4.20	112.00	224.00	15,31	1,38	0,524
10	0,00	26.47	7.25	5.40	2.97	168.00	252.00	15,63	1,70	0,459

Os dados de entrada das cargas pontuais inseridos na aba “Point Sources”, usados para a calibração do modelo no mês de janeiro de 2016, estão representados na Tabela 16.

As vazões dos tributários também foram estimadas através do balanço das entradas e saídas entre as vazões medidas nos pontos de coleta e através do incremento em relação a outubro de 2015 e novembro de 2015.

Tabela 16 - Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de janeiro de 2016.

Fonte Pontual	Localização (km)	Q (m ³ /s)	T (°C)	OD (mgO ₂ /L)	DBO (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	pH
CAPG	48,75	0,056	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CAP1	48,70	0,042	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
LTE	48,66	0,138	26,00	2,00	900,00	50000,00	3000,00	8,50
CAP2	48,20	0,014	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
T 1	35,60	0,284	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,00
T 2	25,08	0,290	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,00
T 3	20,30	1,132	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,00
T 4	8,21	0,320	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	8,00

Nas Figuras 32 a 37 constam os resultados da calibração para as variáveis de qualidade da água OD, DBO, pH, Temperatura, Norg e NH₄ para o mês de janeiro de 2016.

Figura 32 – Resultado da calibração para OD no mês de janeiro de 2016.

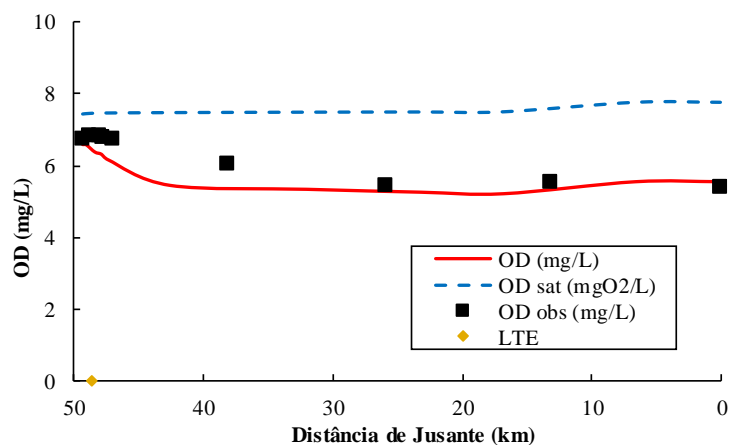


Figura 33 – Resultado da calibração para DBO no mês de janeiro de 2016.

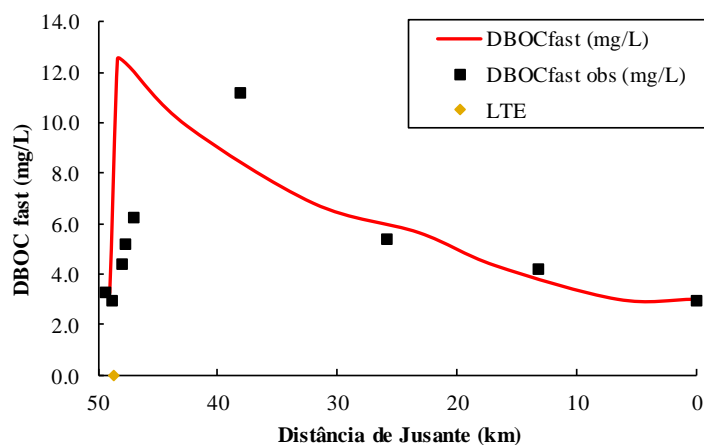


Figura 34 – Resultado da calibração para o pH no mês de janeiro de 2016.

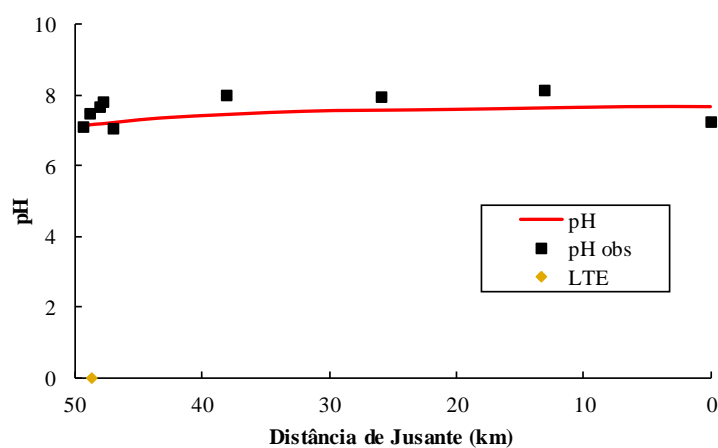


Figura 35 – Resultado da calibração para a Temperatura no mês de janeiro de 2016.

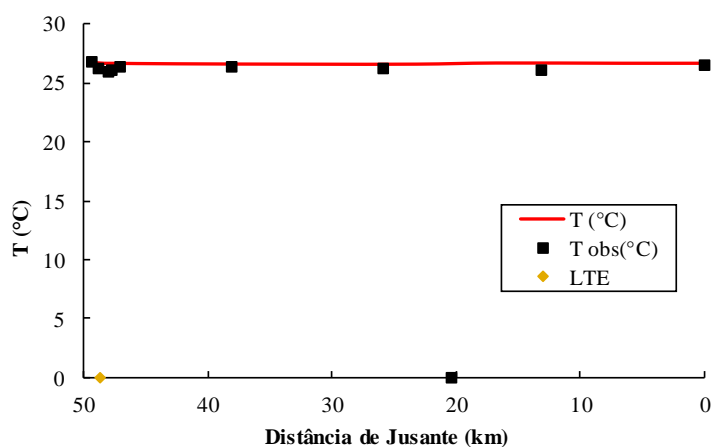
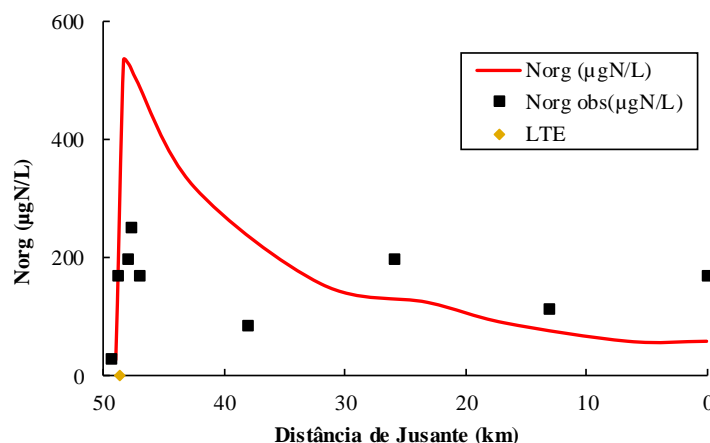
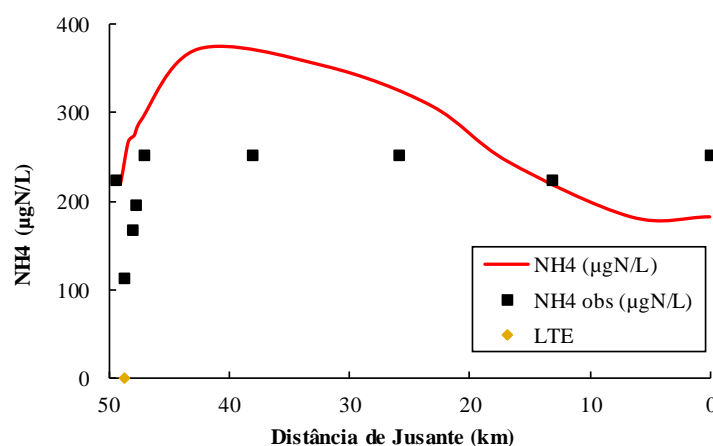


Figura 36 – Resultado da calibração para o Norg no mês de janeiro de 2016.

Figura 37 – Resultado da calibração para o NH₄ no mês de janeiro de 2016.

No mês de janeiro de 2016, os resultados das calibrações são demonstrados nas Figuras 32 a 37 que também se obteve um bom ajuste com o valor do inverso da RMEQ de 0,8026 e seguiram as tendências dos dados observados em campo. A maioria dos parâmetros calibrados mantiveram-se dentro dos padrões recomendados, com exceção da DBO (Figura 33) que perdurou acima de 5 mg/l por cerca de 25 km de extensão do rio com um valor máximo de 12,55 mg/l no quilômetro 48, 4 de distância de jusante, após o ponto do LTE.

Para a calibração do mês de março de 2016, foram utilizados os dados observados da campanha amostral do dia 22/03/2016 que constam na Tabela 17.

Tabela 17 – Dados observados em campo do mês de março de 2016 para calibração no modelo QUAL2Kw.

Ponto	Distância de Jusante (km)	T (° C)	pH	OD (mgO ₂ /L)	DBOC _{fast} (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	Q (m ³ /s)	H (m)	U (m/s)
1	49,33	26,23	7,48	6,61	1,24	112,00	0,00	-	-	-
2	48,75	26,50	7,56	6,45	2,72	280,00	0,00	7,23	0,98	0,325
3	48,04	26,63	7,58	6,42	3,30	70,00	98,00	-	-	-
4	47,71	26,63	7,70	6,47	8,57	280,00	56,00	8,30	0,92	0,489
5	47,01	27,57	7,69	6,36	5,36	420,00	84,00	-	-	-
6	38,09	27,07	7,58	5,47	4,95	224,00	168,00	8,34	0,72	0,446
9	13,13	27,40	7,67	5,59	2,39	336,00	0,00	11,97	1,24	0,436
10	0,00	27,17	7,57	5,54	0,99	406,00	98,00	14,25	1,69	0,459

Os dados de entrada das cargas pontuais inseridos na aba “Point Sources”, usados para a calibração do modelo no mês de março de 2016, estão representados na Tabela 18.

As vazões dos tributários também foram estimadas através do balanço das entradas e saídas entre as vazões medidas nos pontos de coleta e através do incremento em relação a outubro de 2015, novembro de 2015 e janeiro de 2016.

Tabela 18 - Valores aplicados na aba Point Sources para a realização da calibração do modelo no mês de março de 2016.

Fonte Pontual	Localização (km)	Q (m ³ /s)	T (°C)	OD (mgO ₂ /L)	DBO (mgO ₂ /L)	Norg (µgN/L)	NH ₄ (µgN/L)	pH
CAPG	48,75	0,056	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CAP1	48,70	0,042	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
LTE	48,66	0,138	26,00	2,00	700,00	30000,00	100,00	7,00
CAP2	48,20	0,014	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
T 1	35,60	1,589	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	7,50
T 2	25,08	1,891	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	7,50
T 3	20,30	0,150	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	7,50
T 4	8,21	2,280	27,00	6,80	2,00	0,00	0,00	7,50

Nas Figuras 38 a 43 constam os resultados da calibração para as variáveis de qualidade da água OD, DBO, pH, Temperatura, Norg e NH₄ para o mês de março de 2016.

Figura 38 – Resultado da calibração para OD no mês de março de 2016.

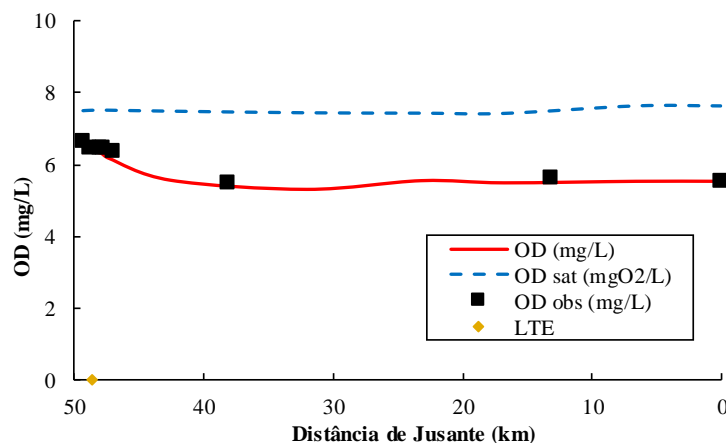


Figura 39 – Resultado da calibração para DBO no mês de março de 2016.

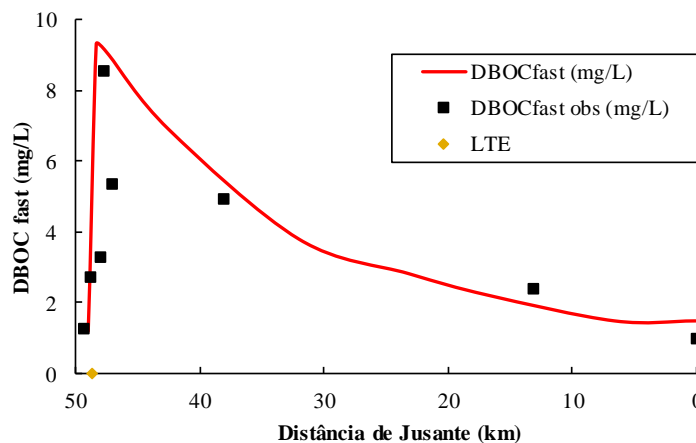


Figura 40 – Resultado da calibração para o pH no mês de março de 2016.

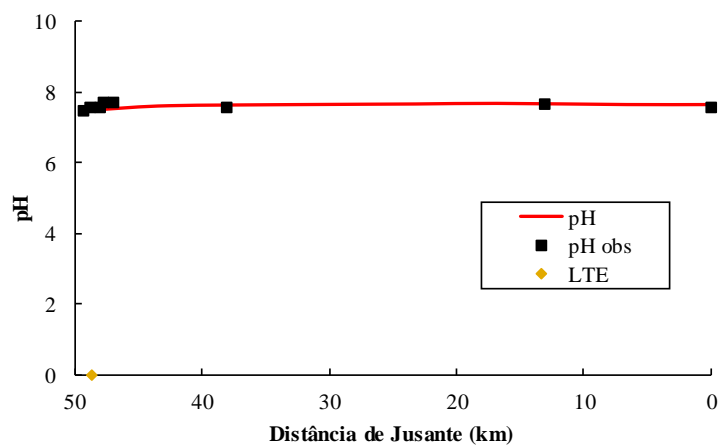


Figura 41 – Resultado da calibração para a Temperatura no mês de março de 2016.

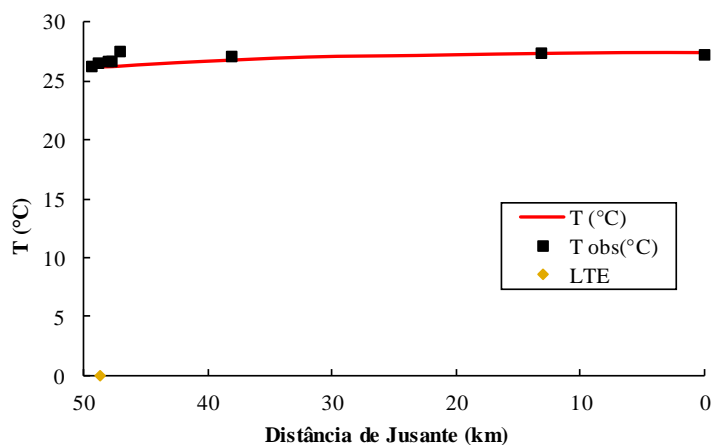
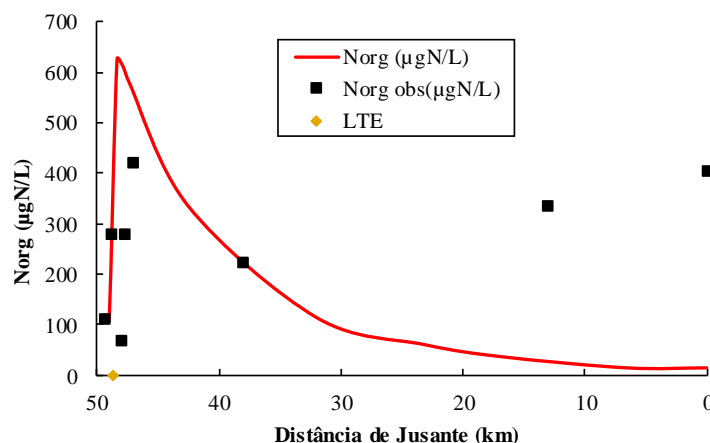
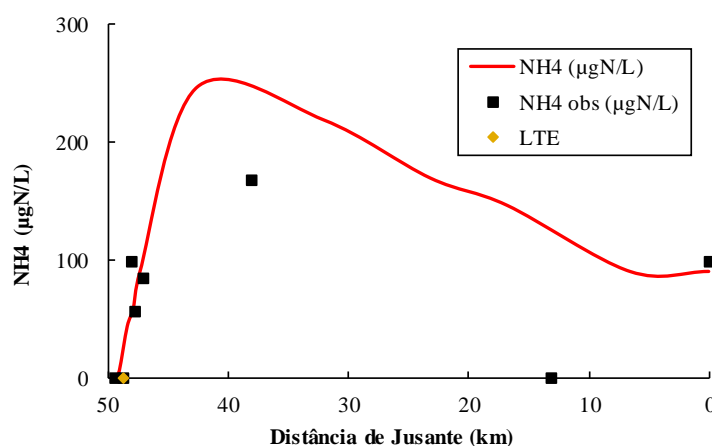


Figura 42 – Resultado da calibração para o Norg no mês de março de 2016.

Figura 43 – Resultado da calibração para o NH₄ no mês de março de 2016.

Já em março de 2016 (Figuras 38 a 43) a calibração gerou um valor do inverso da RMEQ de 0,8080. Da mesma forma que em janeiro de 2016, a maioria dos parâmetros calibrados estiveram dentro das condições padrões, com exceção da DBO (Figura 39) que atingiu um pico no valor de 9,32 mg/L e manteve-se acima de 5mg/L por 5,84 km de extensão.

Em todas as campanhas amostrais a DBO manteve-se acima de 5mg/L por no mínimo 5 km de extensão, estando em desacordo com a legislação, uma vez que ela permite valores acima dos padrões até a distância de percurso para se atingir a mistura total (zona de mistura) que no presente trecho, é em média $1,50 \pm 0,43$ km de distância do ponto do LTE.

5.2 COEFICIENTES DE REAERAÇÃO E CONSTANTES DA NITRIFICAÇÃO

Apesar de calibrar as constantes da nitrificação separadamente, ainda foi necessário o ajuste manual da taxa de conversão de nitrogênio orgânico à amoniacal (Koa) e da taxa de conversão de nitrogênio amoniacal diretamente para nitrato (Kan) para cada um dos trechos.

Embora os coeficientes da reaeração terem sido calculados com base em fórmulas empíricas e por seguinte calibrados automaticamente pelo QUAL2kw, eles foram ajustados manualmente a fim de melhorar a calibração. Os valores dos coeficientes são fundamentais pois são utilizados nos cenários futuros para a modelagem da qualidade da água e todos os coeficientes obtidos estão representados na Tabela 19.

Tabela 19 – Coeficientes calibrados referentes aos trechos simulados no QUAL2Kw.

Outubro de 2015					Novembro de 2015				
Trechos	K2 dia ⁻¹	K1 dia ⁻¹	Koa dia ⁻¹	Kan dia ⁻¹	Trechos	K2 dia ⁻¹	K1 dia ⁻¹	Koa dia ⁻¹	Kan dia ⁻¹
Trecho 1	4.23	0.10	0.20	0.60	Trecho 1	5.98	0.10	0.20	0.50
Trecho 2	5.25	0.10	0.20	0.60	Trecho 2	7.06	0.10	0.20	0.50
Trecho 3	5.25	0.10	0.20	0.60	Trecho 3	6.06	0.10	0.20	0.50
Trecho 4	7.71	0.10	0.20	0.60	Trecho 4	4.14	0.10	0.20	0.50
Trecho 5	7.71	0.10	0.20	0.60	Trecho 5	4.14	0.10	0.20	0.50
Trecho 6	2.96	0.10	0.20	0.60	Trecho 6	3.15	0.10	0.10	0.50
Trecho 7	1.98	0.10	0.20	0.60	Trecho 7	2.17	0.10	0.10	0.50
Trecho 8	1.95	0.10	0.20	0.60	Trecho 8	1.39	0.10	0.10	0.50
Trecho 9	0.91	0.10	0.20	0.60	Trecho 9	0.58	0.10	0.10	0.50
Janeiro de 2016					Março de 2016				
Trechos	K2 dia ⁻¹	K1 dia ⁻¹	Koa dia ⁻¹	Kan dia ⁻¹	Trechos	K2 dia ⁻¹	K1 dia ⁻¹	Koa dia ⁻¹	Kan dia ⁻¹
Trecho 1	4.91	0.10	0.20	1.00	Trecho 1	3.03	0.10	0.20	1.00
Trecho 2	6.00	0.10	0.20	1.00	Trecho 2	4.08	0.10	0.20	1.00
Trecho 3	6.00	0.10	0.20	1.00	Trecho 3	4.08	0.10	0.20	1.00
Trecho 4	4.74	0.10	0.20	1.00	Trecho 4	4.47	0.10	0.20	1.00
Trecho 5	4.74	0.10	0.20	1.00	Trecho 5	4.47	0.10	0.20	1.00
Trecho 6	4.21	0.10	0.20	1.00	Trecho 6	3.09	0.10	0.20	1.00
Trecho 7	3.21	0.10	0.10	1.00	Trecho 7	3.11	0.10	0.20	1.00
Trecho 8	2.31	0.10	0.10	1.00	Trecho 8	2.52	0.10	0.20	1.00
Trecho 9	2.30	0.10	0.10	1.00	Trecho 9	1.26	0.10	0.20	1.00

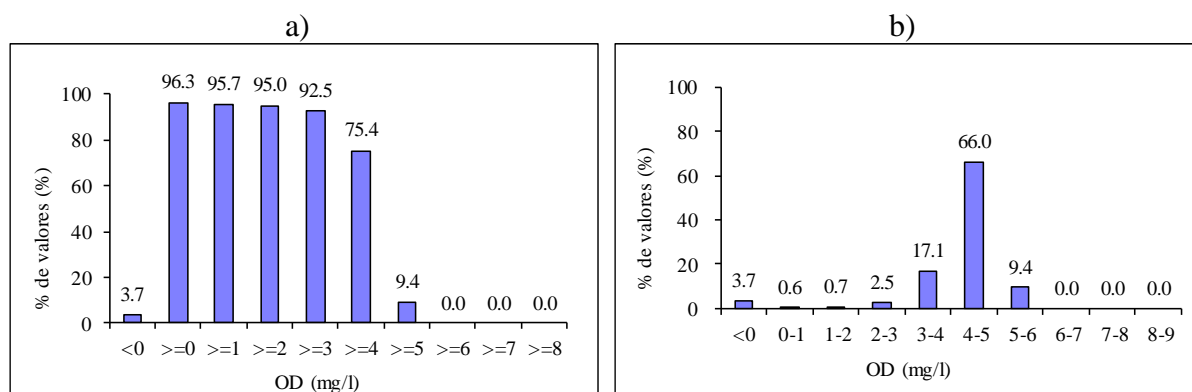
5.3 ANÁLISE DE INCERTEZA

Com intuito de avaliar o resultado do OD nas campanhas amostrais, foi realizada uma Simulação Monte Carlo em distâncias distintas para cada um dos 4 modelos calibrados, com 1000 rodadas cada, utilizando distribuição normal. Dentre os parâmetros avaliados temos a vazão do LTE (Q_{LTE}), o OD e a concentração de saturação (C_s) no rio, K_1 e K_2 . Estes parâmetros tiveram uma certa variação percentual em torno do valor fixo, refletindo o maior ou menor grau de incerteza, garantindo assim uma grande faixa de valores.

Para tal, variou-se Q_{LTE} e K_1 em 30%, OD no rio em 10%, C_s em 5% e K_2 em 50%. Não há incerteza com relação à distância de percurso do rio, e neste caso o percentual de variação foi adotado como nulo. Por outro lado, a incerteza no coeficiente K_2 é elevada, por ter sido determinado de forma empírica.

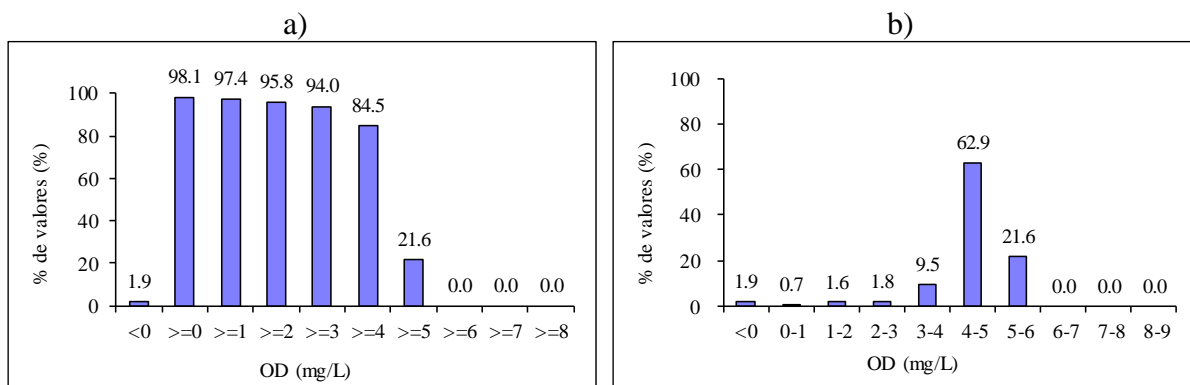
Os resultados destas análises de incerteza estão representados nas Figuras 44, 45, 46 e 47 para as campanhas amostrais de outubro de 2015 no km 32,00, novembro de 2015 no km 42,55, janeiro de 2016 no km 16,77, e março de 2016 no km 47,36, respectivamente.

Figura 44 – Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 32,00 para a calibração do mês de outubro de 2015.



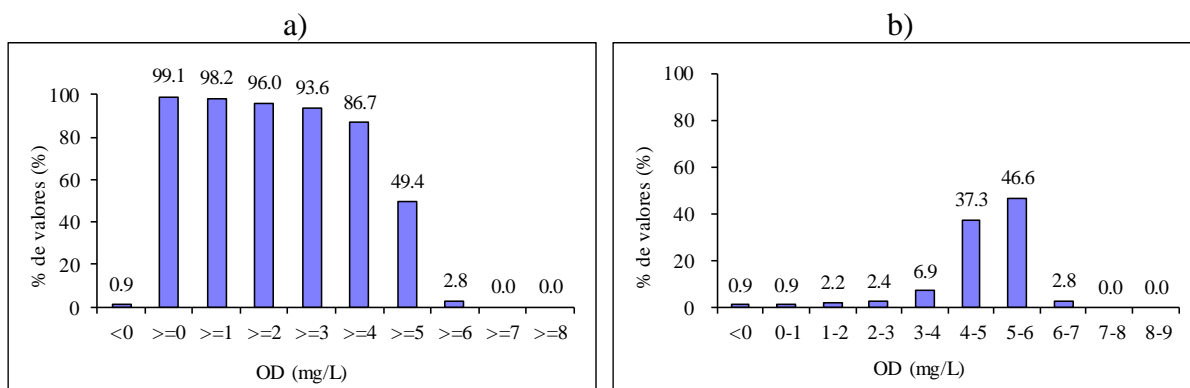
Nota-se na Figura 44a que no mês de outubro de 2015, apenas 9,4% das simulações conduziram ao atendimento da legislação para corpos d'água de Classe 2 e que 66% das simulações conduziram a um $OD_{mín}$ entre 4 e 5 mg/L (Figura 44b).

Figura 45 – Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 42,55, para a calibração do mês de novembro de 2015.



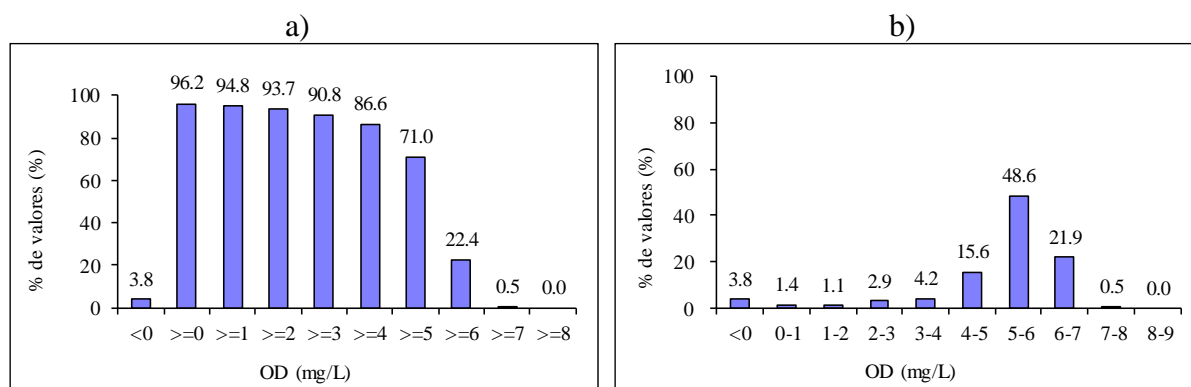
No mês novembro de 2015, há uma probabilidade de 21,6% de que o lançamento de esgotos conduzirá ao atendimento à legislação, dentro das condições assumidas para a presente Simulação Monte Carlo (Figura 45a) e 62,9% das simulações conduziram ao valor de $OD_{\text{mín}}$ entre 4 e 5 mg/L (Figura 45b).

Figura 46 – Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 16,77, para a calibração do mês de janeiro de 2016.



Em janeiro de 2016, o cenário melhora com o percentual de atendimento a legislação que se eleva para 49,4% (Figura 46a) e o $OD_{\text{mín}}$ fica entre os valores de 5 e 6 mg/L (Figura 46b) com probabilidade de 46,6%.

Figura 47 – Distribuição de frequência acumulada (a) e distribuição de frequência simples (b) das concentrações de OD no km 47,36, para a calibração do mês de março de 2016.



O melhor cenário de atendimento à legislação ocorre no mês de março de 2016, onde 71% das simulações para o OD_{\min} se encontram acima de 5 mg/L (Figura 47a) com probabilidade de 48,6% de permanecerem entre os valores 5 e 6 mg/L e de 21,9% das simulações conduzirem a 6 e 7 mg/L (Figura 47b).

5.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

A análise de sensibilidade, também realizada pela Simulação Monte Carlo com distribuição normal, foi efetuada no modelo de OD para os coeficientes K_1 e K_2 em cada campanha amostral utilizando os mesmos parâmetros e percentuais de variações da análise de incerteza realizado no item anterior. Separaram-se os dados em dois grupos de amostras para 1000 simulações, em que os primeiros 500 valores de todos os dados estão associados ao OD_{\min} abaixo da mediana (Grupo 1), e os últimos 500 valores estão associados ao OD_{\min} acima da mediana (Grupo 2).

Os resultados destas análises estão representados nas Figuras 48, 49, 50 e 51 para as campanhas amostrais de outubro de 2015 no km 32,00, novembro de 2015 no km 42,55, janeiro de 2016 no km 16,77, e março de 2016 no km 47,36, respectivamente.

Figura 48 – Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 32,00 para o mês de outubro de 2015.

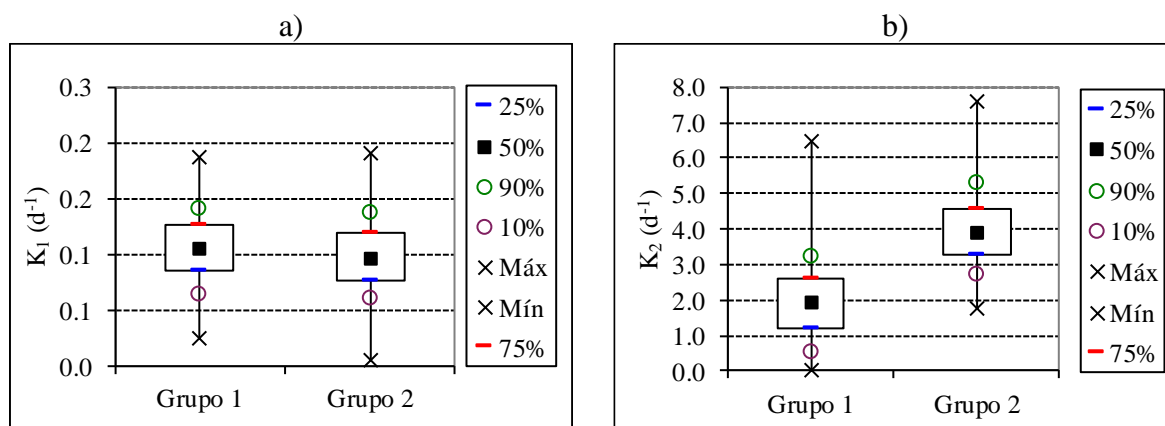


Figura 49 – Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 42,55 para o mês de novembro de 2015.

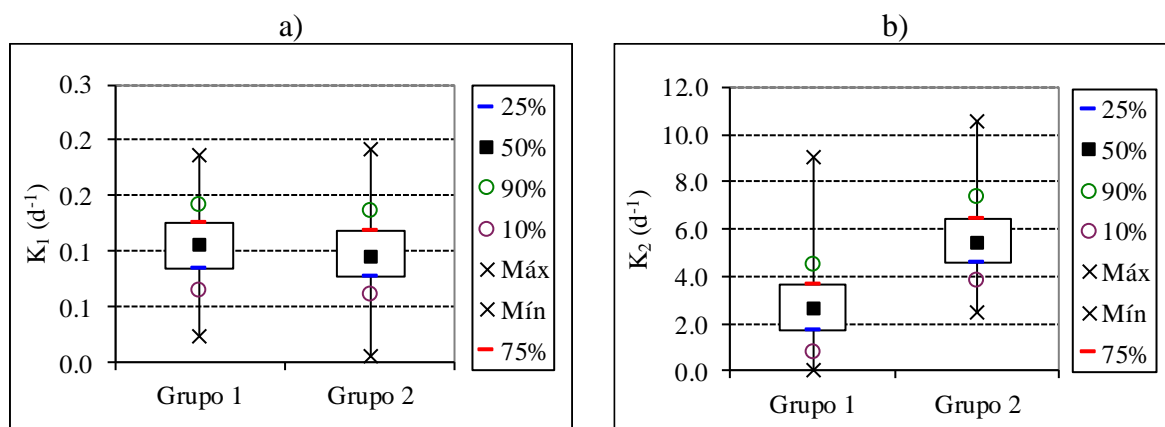


Figura 50 – Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 16,77 para o mês de janeiro de 2016.

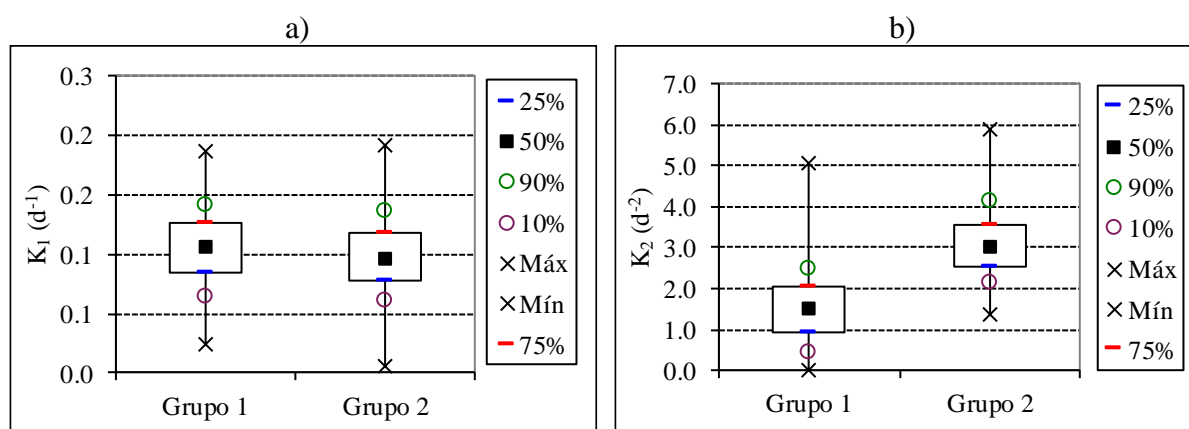
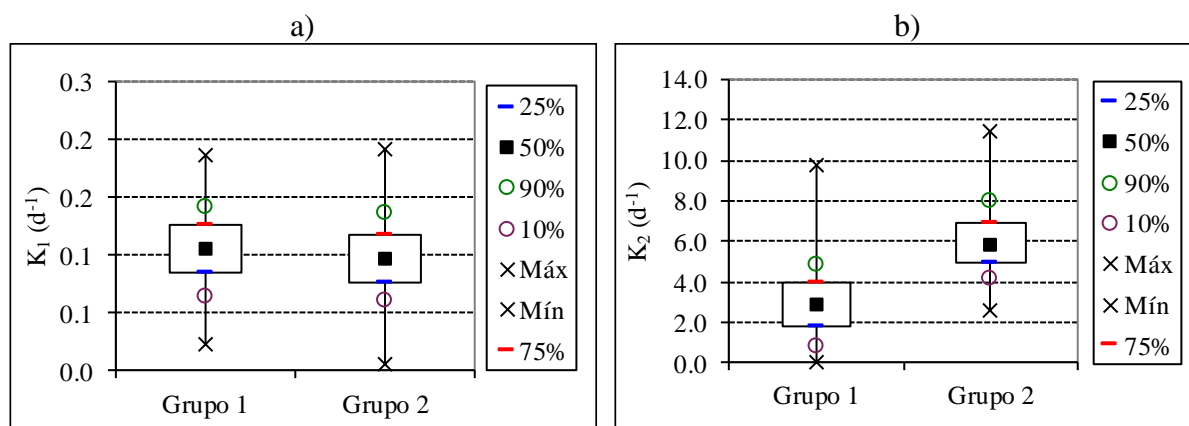


Figura 51 – Simulação Monte Carlo para análise de sensibilidade dos parâmetros K_1 (a) e K_2 (b) no km 47,36 para o mês de março de 2016.



Observando os gráficos apresentados para todas as campanhas amostrais, através de uma análise visual, os dados de K_1 no Grupo 1 e no Grupo 2, não possuem diferenças significativas, onde a média das duas amostras tendem a serem iguais e que o valor de K_1 não seja determinante nos valores de OD_{\min} . Já os dados de K_2 nas amostras do Grupo 2 de todas as campanhas amostrais estão associados a valores bem mais elevados do que na amostra do Grupo 1 sendo significativamente diferentes. Com base no teste t não paramétrico, confirmou-se que há diferenças entre os grupos de amostra 1 e 2, para a variável K_2 , com significância de 5% ($p \leq 0,05$), ou seja, o coeficiente K_2 é importante nos resultados de OD_{\min} .

5.5 QUALIDADE E ECOTOXICIDADE DA ÁGUA

Os resultados das análises físico-químicas e microbiológicas do mês de fevereiro e setembro de 2017, nos pontos 2, 4, 6, 7 e 9 estão apresentadas na Tabela 20 e Tabela 21 respectivamente.

Tabela 20 – Resultados dos parâmetros físico-químicos e microbiológicos do mês de fevereiro de 2017 em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9).

Ponto	CT (NMP/100 mL)	pH	DBO ₅ (mg/L)	NH ₄ (mg/L de N)	Turbidez (NTU)	P _{Total} (mg/L de P)	OD (mg/L)	SDT (mg/L)	Nitrato (mg/L de N)	Sólidos Totais (mg/L)	SST (mg/L)
2	685,00	7,67	1,05	0,04	73,70	0,09	6,40	122,00	0,00	159,00	37,00
4	250,00	7,63	2,40	0,04	49,70	0,07	6,60	103,00	0,00	133,00	30,00
6	787,50	7,47	4,90	0,11	54,00	0,15	5,80	119,00	0,30	161,00	42,00
7	650,00	7,41	2,47	0,07	63,00	0,15	5,10	134,00	0,80	177,00	43,00
9	125,00	7,55	2,10	0,04	69,70	0,12	5,10	123,00	1,00	182,00	59,00

Em fevereiro de 2017, os parâmetros físico-químicos e microbiológicos atenderam às condições de qualidade da água para rios de classe 2, com exceção do fósforo total que ultrapassou o recomendado nos pontos 6, 7 e 9, após o lançamento de efluentes industriais.

Tabela 21 – Resultados dos parâmetros físico-químicos e microbiológicos do mês de setembro de 2017 em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9).

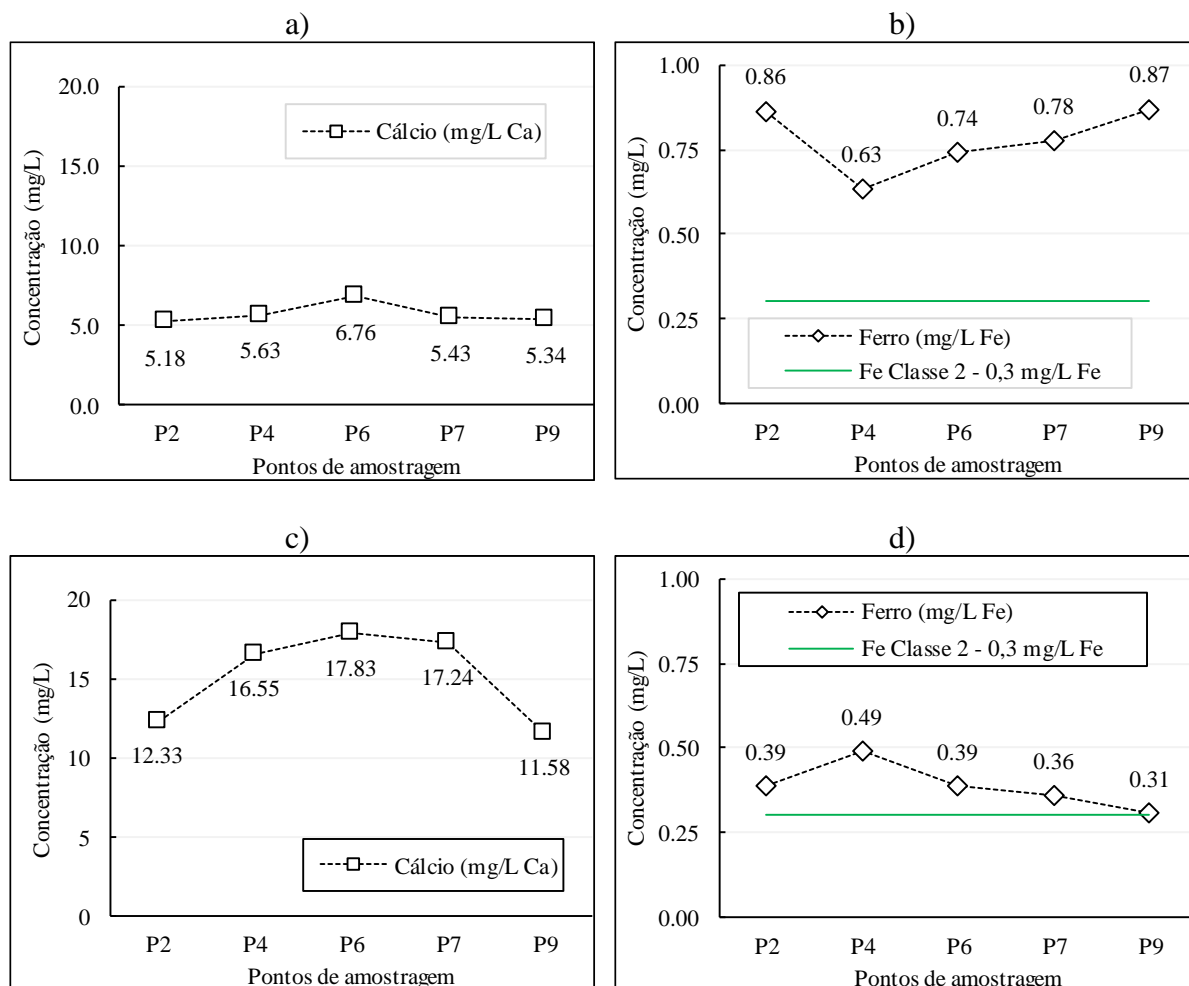
Ponto	CT (NMP/100 mL)	pH	DBO ₅ (mg/L)	NH ₄ (mg/L de N)	Turbidez (NTU)	P _{Total} (mg/L de P)	OD (mg/L)	SDT (mg/L)	Nitrato (mg/L de N)	Sólidos Totais (mg/L)	SST (mg/L)
2	167,50	8,11	0,00	0,23	5,71	0,01	7,23	90,00	0,00	127,00	37,00
4	1231,25	8,07	2,00	1,14	7,75	0,06	6,91	126,00	0,10	156,00	30,00
6	185,00	8,05	7,25	2,26	10,05	0,19	4,55	186,00	1,10	228,00	42,00
7	93,75	7,04	4,85	0,64	12,55	0,16	5,11	99,50	2,60	142,50	43,00
9	150,00	7,07	2,30	0,48	10,70	0,15	5,18	113,00	3,10	172,00	59,00

Já no mês de setembro de 2017, as concentrações de DBO e de OD no ponto 6, não atingiram os valores recomendados pela CONAMA/ 357 para rios de classe 2, permanecendo, acima de 5 mg/L e abaixo de 5 mg/L, respectivamente. Os coliformes termotolerantes também ultrapassou as recomendações no ponto 4, e da mesma forma que em fevereiro, o fósforo total também ultrapassou o valor recomendado nos pontos 6, 7 e 9.

Em relação aos metais, o cálcio não possui padrões de concentração dispostos na presente resolução. As concentrações de cálcio mantêm-se constante no decorrer do trecho, sendo maior no ponto 6 em fevereiro e em setembro de 2017. De acordo com a Figura 52b, as concentrações de ferro permaneceram em média $2,59 \pm 0,33$ vezes a mais que o valor recomendado para rios de classe 2, em fevereiro de 2017. Já na Figura 52d, em setembro de 2017, as concentrações de

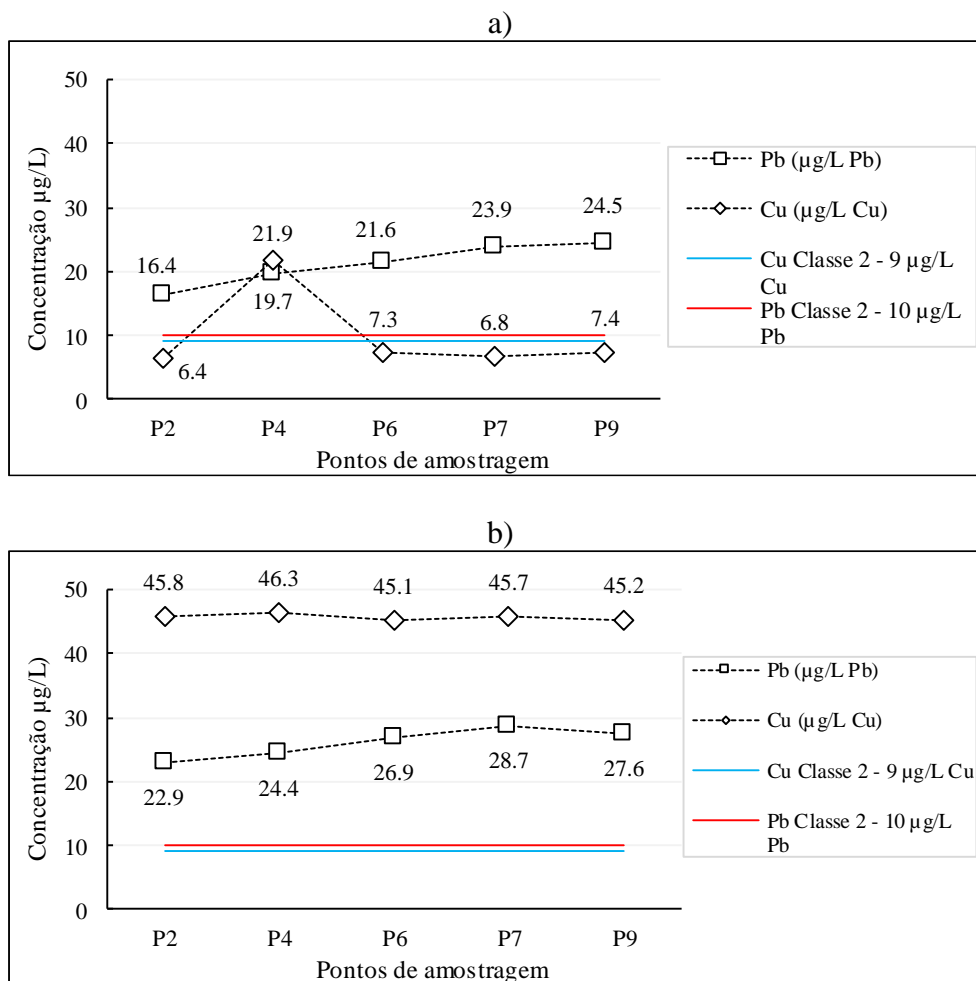
ferro ficaram próximas das condições padrões, atingindo um pico de 0,49 mg/L no ponto 4 com 0,19 mg/L acima do recomendado.

Figura 52 – Concentrações de Cálcio (mg/L Ca) e de Ferro (mg/L Fe) em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9) em fevereiro (a) e (b), e em setembro (c) e (d) de 2017.



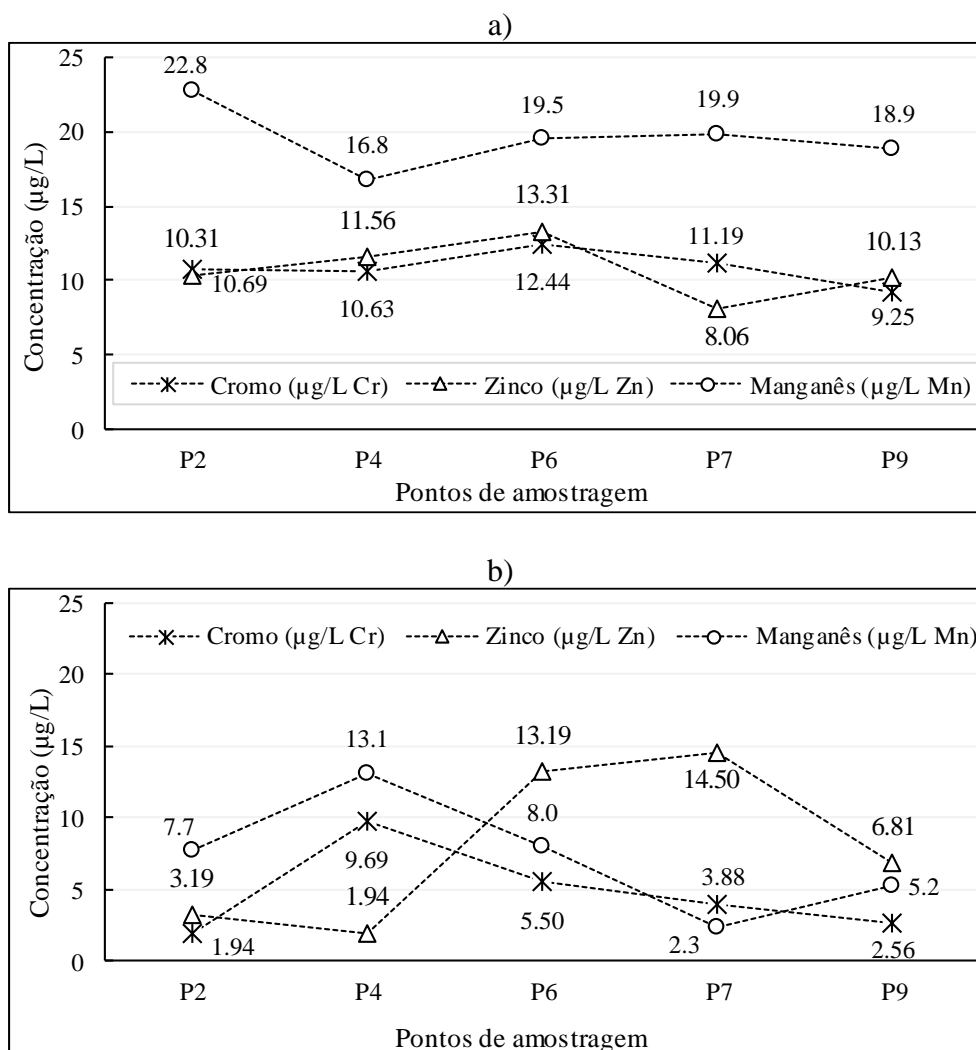
Já as concentrações de chumbo apresentam-se altas em todos os pontos analisados, alcançando no ponto 9 concentrações 145% a mais do que o valor recomendado. A concentração de cobre no ponto 4, logo após o lançamento dos efluentes de curtume, teve um pico de 21,88 µg/L Cu, ou seja, 143% a mais em relação ao valor recomendado de 9 µg/L Cu, como pode ser observado na Figura 53a. Em setembro de 2017, Figura 53b, as concentrações de chumbo ficaram em média, $2,61 \pm 0,21$ vezes maiores em relação ao valor recomendado de 10 µg/L e as concentrações de cobre permaneceram em média $5,07 \pm 0,05$ vezes maior que o recomendado pela resolução CONAMA 357/2005.

Figura 53 – Concentrações de Chumbo ($\mu\text{g/L Pb}$) e Cobre ($\mu\text{g/L Cu}$) em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9) em fevereiro (a) e setembro (b) de 2017.



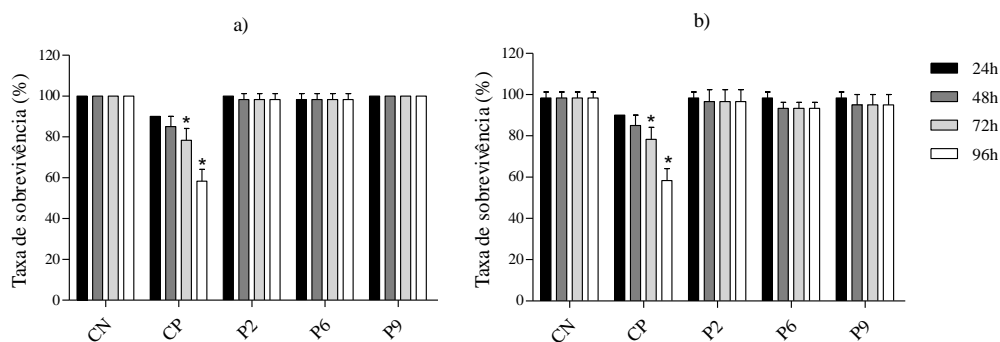
Quanto às concentrações de cromo, zinco e manganês em fevereiro e setembro de 2017 (Figura 54a e 54b), todos os valores encontrados nos 5 pontos analisados tiveram abaixo dos valores recomendados para rios de classe 2 e os elementos cádmio e níquel não foram detectados pelo método utilizado.

Figura 54 – Concentrações de Cromo ($\mu\text{g/L Cr}$), Zinco ($\mu\text{g/L Zn}$), e Manganês ($\mu\text{g/L Mn}$) em diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P4, P6, P7 e P9) em fevereiro (a) e setembro (b) de 2017.



As amostras de água coletadas em diferentes pontos no rio dos Bois (P2, P6 e P9), em fevereiro de 2017, não demonstraram mortalidade significativa. A taxa de sobrevivência dos organismos expostos foi de aproximadamente 100% em todas as amostras testadas como podem ser observadas na Figura 55a. Já na segunda coleta, em setembro de 2017, (Figura 55b) pode ser observado uma redução de mais que 5% na sobrevivência dos embriões expostos a partir de 48h no ponto 6.

Figura 55 – Taxa de sobrevivência de embriões e larvas de *Danio rerio* expostas às amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P6, P9) em fevereiro (a) e setembro (b) por 24, 48, 72 e 96 h. As barras representam a média \pm desvio padrão de três testes. Controle negativo: CN (água de manutenção) e controle positivo: CP (3,4-dicloroanilina a 4 mg/L).

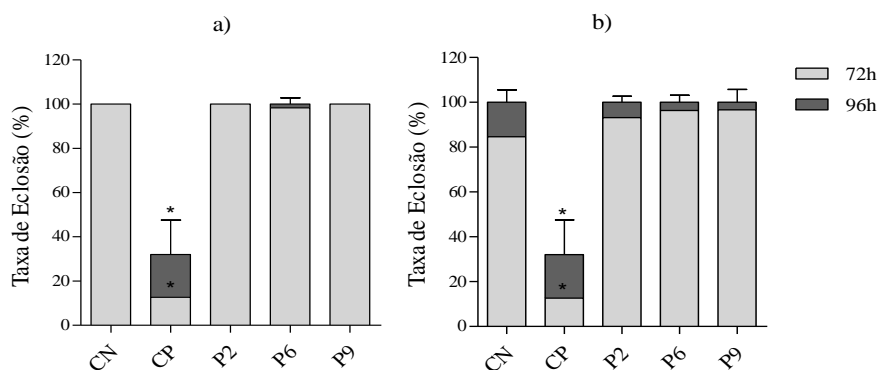


Nota: * estatisticamente diferente em relação ao controle negativo (teste de Dunnett, $p < 0,05$).

O sucesso na eclosão de uma larva foi definido como a ruptura da membrana do ovo e a saída da mesma. A eclosão normalmente ocorre entre 48 a 72 horas (OECD, 2013). Não houve alterações significativas na taxa de eclosão dos embriões de zebrafish expostos às amostras coletadas nos três pontos avaliados no mês de fevereiro, como pode ser observado na Figura 56a.

Já na segunda coleta em setembro (ver Figura 56b) a prevalência de eclosão também ocorreu no período de 72h, porém foi observado no ponto 6 que $14,1 \pm 7,9\%$ dos embriões eclodiram no período de 48h.

Figura 56 – Taxa de eclosão de larvas de *Danio rerio* expostas a diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P6, P9) em fevereiro (a) e setembro (b). As barras representam a média \pm desvio padrão de três testes. Controle negativo: CN (água de manutenção) e controle positivo: CP (3,4-dicloroanilina a 4 mg/L).

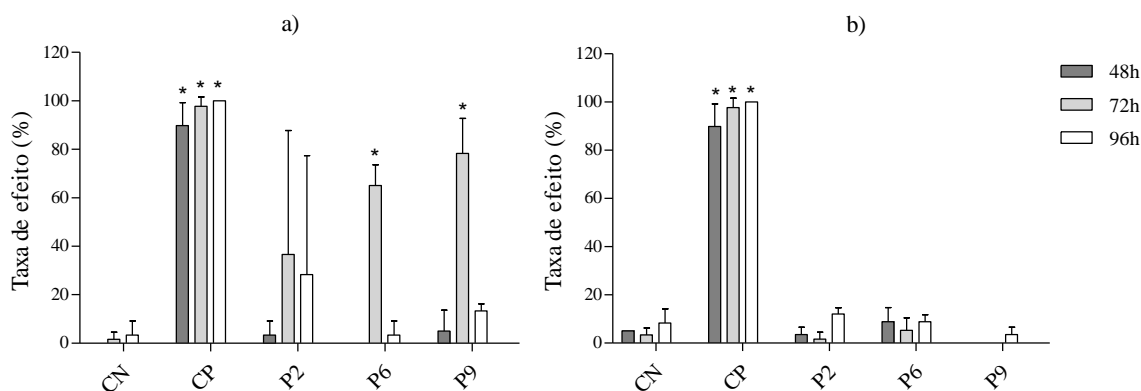


Nota: * estatisticamente diferente em relação ao controle negativo (teste de Dunnett, $p < 0,05$)

Os efeitos subletais da primeira coleta foram observados a partir de 48h de exposição. As malformações mais frequentes observadas foram: má absorção de saco vitelínico, deformação na cauda, ausência de pigmentação e edema cardíaco. Tais efeitos se apresentaram maior em 72h sendo estatisticamente significativos nesse período somente nos pontos 6 e 9. Estes efeitos foram revertidos em 96h. O ponto 9 mostrou maior efeito em 72h (média de 80%) quando comparado com os pontos 2 (média de 36,6%) e 6 (média de 65%) no mesmo período de exposição. A frequência dos efeitos subletais induzidos pelas amostras de água coletadas nos 3 pontos estão apresentados na Figura 57a.

Na segunda coleta (Figura 57b) foi observado uma redução nos efeitos em todos os pontos e períodos avaliados. Os efeitos subletais foram observados a partir de 48h de exposição. E as malformações mais frequentes observadas foram: má absorção de saco vitelínico, deformação na cauda, acúmulo sanguíneo e edema cardíaco.

Figura 57 – Taxa de efeitos de embriões e larvas de *Danio rerio* expostas a diferentes amostras de água coletadas em diferentes pontos do rio (P2, P6, P9) em fevereiro de 2017 (a) e setembro de 2017 (b). As barras representam a média \pm desvio padrão de três testes. Controle negativo: CN.



Nota: * estatisticamente diferente em relação ao controle negativo (teste de Dunnett, $p < 0,05$)

As malformações apresentadas com maiores efeitos nos pontos 6 e 9 podem ser explicadas pelas altas concentrações de metais como o ferro, chumbo e cobre, que se encontraram fora dos valores recomendados pela legislação vigente. Em relação às características físico químicas e microbiológicas, apesar de não atenderem os padrões de fósforo total e coliformes termotolerantes, não foram responsáveis para explicar os efeitos causados no desenvolvimento de embriões de zebrafish.

Nas Fotomicroscopias a seguir estão ilustrados os estágios embrio-larval do zebrafish no controle negativo e nas amostras dos pontos 2, 6 e 9, durante o período de exposição de 24h (Figura 58), 48h (Figura 59), 72h (Figura 60) e 96 h (Figura 61).

Figura 58 - Fotomicroscopia de embriões de *D. rerio* expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 24h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 24h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 24h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 24h.

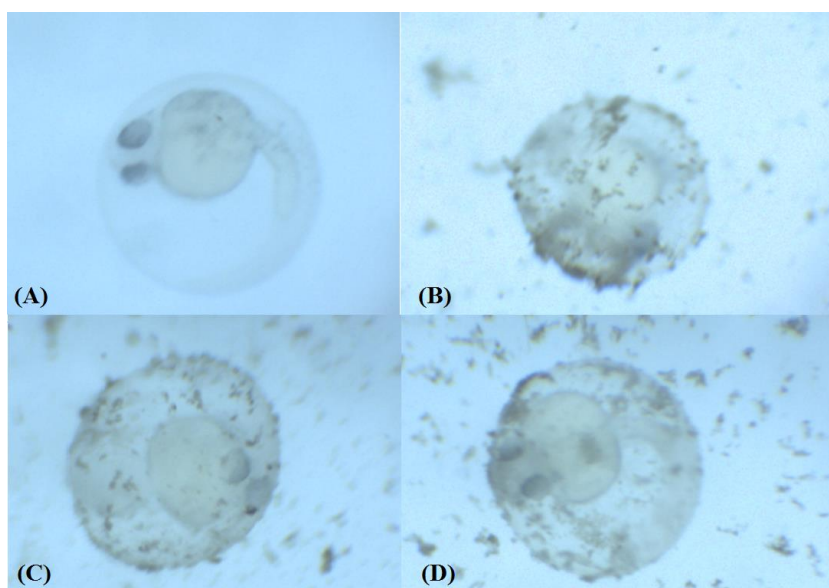


Figura 59 - Fotomicroscopia de embriões de *D. rerio* expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do Rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 48h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 48h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 48h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 48h.

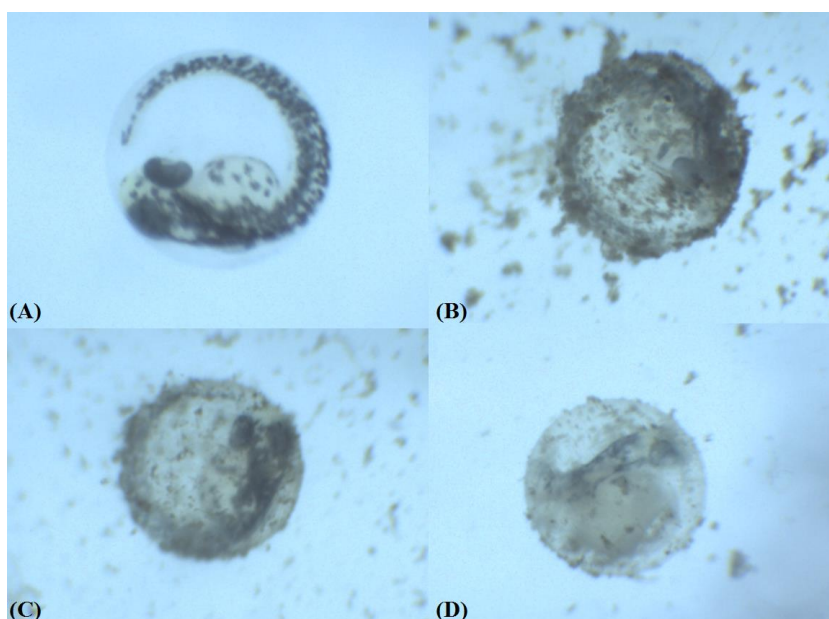
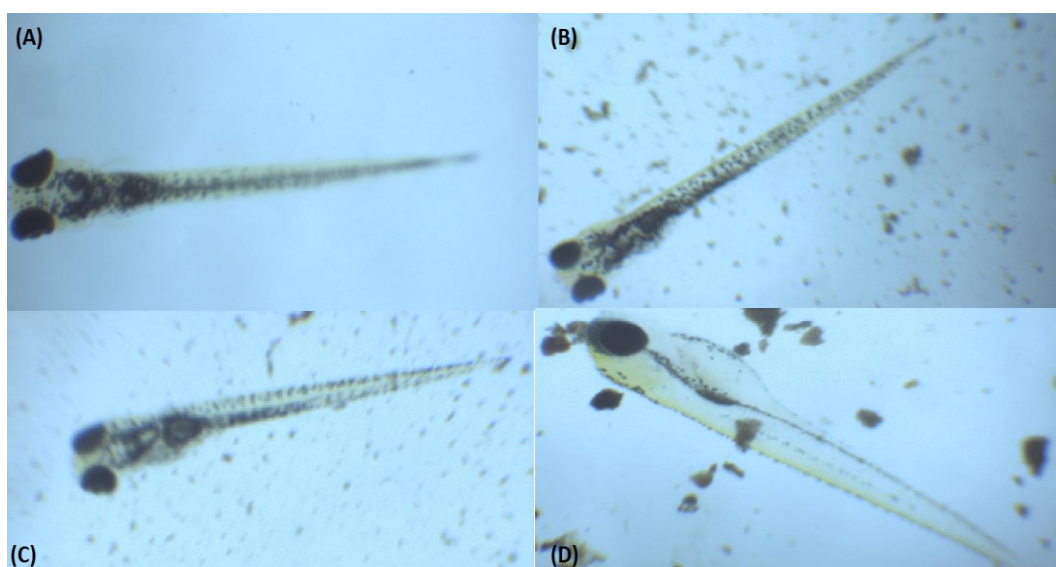


Figura 60 - Fotomicroscopia de embriões de *D. rerio* expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do Rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 72h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 72h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 72h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 72h. A seta vermelha indica (□) representando má absorção do saco vitelínico.



Figura 61 - Fotomicroscopia de embriões de *D. rerio* expostos a amostras de águas coletadas em diferentes pontos do Rio dos Bois em aumento de 2,5 x: (A) Embrião exposto ao controle negativo após 96h; (B) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 2 por 96h; (C) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 6 por 96h; (D) Embrião exposto a amostra coletada no Ponto 9 por 96h.



6 CONCLUSÃO

O presente trabalho permitiu concluir que:

- ◆ O modelo QUAL2Kw apresentou-se como uma boa ferramenta para a simulação de lançamentos pontuais no rio dos Bois apresentando um bom ajuste no ato da calibração, com o valor de RMEQ médio de $0,808 \pm 0,005$ para todas as campanhas amostrais;
- ◆ o cenário mais crítico ocorreu na menor vazão detectada no manancial, onde foi observada a maior concentração dos poluentes, no mês de outubro de 2015, em que se observa um decaimento dos dados de OD e aumento dos dados de DBO e NH_4 em campo devido as contribuições de fontes difusas ao longo do trecho ou das cargas de altas concentrações derivadas dos tributários;
- ◆ a análise de incerteza por simulação Monte Carlo demonstrou que é possível apresentar os resultados em forma probabilística e reforçou o cenário mais crítico de outubro de 2015, em que, apenas 9,4 % das simulações conduziram a um $\text{OD}_{\text{mín}}$ maior que 5 mg/L.
- ◆ a análise de sensibilidade expôs que o valor de K_1 não é determinante nos valores de $\text{OD}_{\text{mín}}$ e confirmou o quão é significativo o coeficiente de reaeração na determinação de concentrações de OD, com base no teste t não paramétrico com significância de $p \leq 0,05$;
- ◆ após o lançamento de efluentes, no ponto 4, houve um aumento na concentração de alguns parâmetros de qualidade e de metais traços analisados, como fósforo total, ferro, chumbo e cobre, e maiores efeitos significativos na fase do desenvolvimento de embriões de zebrafish, na avaliação da ecotoxicidade;
- ◆ em relação ao enquadramento na Resolução CONAMA 357/05, o trecho após o lançamento de efluentes se encontra em não conformidade devido ao parâmetro DBO, que em todas as campanhas amostrais manteve-se acima de 5mg/L por no mínimo 5 km de extensão, ultrapassando a zona de mistura, que é em média $1,50 \pm 0,43$ km de distância do ponto do LTE.

7 RECOMENDAÇÕES

- Realizar validações com amostragem efetuadas em outros anos, mas nos mesmos meses em que foram desempenhadas as calibrações, ou seja, nos meses de outubro, novembro, janeiro e março.
- Estimar a carga difusa nos trechos a jusante do ponto de LTE para diminuir a incerteza em relação a carga pontual e melhorar a calibração do modelo.
- Realizar novos testes de ecotoxicidade para mostrar a causalidade das malformações apresentadas nos pontos 6 e 9 com as altas concentrações de metais identificados.

8 REFERÊNCIAS

ANA. Agência Nacional de Águas. Plano de Ação de Recursos Hídricos da Unidade de Gestão Hídrica Turvo e dos Bois. Brasil: Agência Nacional de Águas, 2013a. p. 181.

_____. **Agência Nacional de Águas. Conjuntura dos recursos hídricos no Brasil.** ANA. Brasília - DF: ANA, 2013b.

APHA-AWWA-WEF. **Standard Methods for examination of water and wastewater.** 22. ed. Washington, DC: American Public Health Association, 2012.

BARROS, F. M. *et al.* BALANÇO DE OXIGÊNIO NO RIO TURVO SUJO-MG EM DIFERENTES ÉPOCAS DO ANO. **Engenharia na Agricultura**, 2011. v. 19, n. 1, p. 72–80.

BENITES, L. M. *et al.* Avaliação do potencial mutagênico de cobre da água do rio Uruguai. **Ciência e Natura**, 31 jul. 2014. v. 36, n. 2, p. 107–113. Disponível em: <<http://cascavel.ufsm.br/revistas/ojs-2.2.2/index.php/cienciaenatura/article/view/13610>>.

BOTTINO, F. *et al.* Calibration of QUAL2K model in brazilian micro watershed: effects of the land use on water quality. **Acta Limnologica Brasiliensia**, 2010. v. 22, n. 4, p. 474–485. Disponível em: <<http://doi.editoracubo.com.br/10.4322/actalb.2011.011>>.

BRASIL. Lei Federal nº 9433, de 8 de janeiro de 1997. Institui a Política Nacional de Recursos Hídricos, cria o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos e outras providências. **MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE - MMA.** Brasília - DF: Casa Civil, 1997.

_____. Ministério do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente - CONAMA. Resolução nº 357, de 17 de março de 2005. Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento e outras providências. **Diário Oficial da União.** Brasília: MMA, 2005, p. 58–63.

_____. Ministério do Meio Ambiente. Conselho Nacional de Recursos Hídricos. Moção CNRH nº 57, de 16 de dezembro de 2010. Recomenda princípios e prioridades de investimento em ciência, tecnologia e inovação em recursos hídricos. **Conjunto de normas Legais: recursos Hídricos.** 8. ed. Brasília - DF: MMA, 2014, p. 596–616.

BROWN, L. C.; BARNWELL, T. O. **The enhanced stream water quality models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and user manual.** [S.l.]: US Environmental Protection Agency. Office of Research and Development. Environmental Research Laboratory, 1987.

CETESB. Guia Nacional de Coleta e Preservação de Amostras - Água, Sedimento, Comunidades Aquáticas e Efluentes Líquidos. **Companhia Ambiental do Estado de São Paulo**, 2011. p. 326p.

CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling.** New York, New York, USA: McGraw-Hill Education, 1997. V. 1.

CHARBONNEAU, P.; KNAPP, B. A User's Guide to PIKAIA 1.0. 1 jan. 1995. Disponível em: <<http://opensky.ucar.edu/islandora/object/technotes:186>>. Acesso em: 23 nov. 2017.

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**, 1 out. 2003. v. 314–316, n. 3, p. 335–377. Disponível em:

<<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0048969703000639>>.

ESTEVEZ, F. De A. Gênese dos ecossistemas lacustres. **Fundamentos de limnologia**. 2ª ed. Rio de Janeiro: Interciência, 1998, p. 84–103.

FLYNN, K. F. *et al.* Model-Based Nitrogen and Phosphorus (Nutrient) Criteria for Large Temperate Rivers: 1. Model Development and Application. **JAWRA Journal of the American Water Resources Association**, abr. 2015. v. 51, n. 2, p. 421–446. Disponível em: <<http://doi.wiley.com/10.1111/jawr.12253>>.

FORMENTINI, T. A. **Coefficientes de desoxigenação e de reaeração superficial em trechos do rio Vacacaí Mirim**. [S.l.]: Universidade Federal de Santa Maria, 2010. Mestrado. Disponível em: <http://cascavel.cpd.ufsm.br/tede/tede_arquivos/20/TDE-2011-01-28T105411Z-2995/Publico/FORMENTINI, THIAGO AUGUSTO.pdf>. Acesso em: 15 nov. 2017.

FRAGOSO JR., C. R.; FERREIRA, T. F.; MARQUES, D. Da M. **Modelagem ecológica em ecossistemas aquáticos**. São Paulo: Oficina de Textos, 2009.

GOIÁS. Decreto nº 1.745, de 06 de dezembro de 1979. Aprova o Regulamento da Lei nº8544, de 17 de outubro de 1978, que dispõe sobre a prevenção e o controle da poluição do meio ambiente. **Gabinete Civil da Governadoria**. Goiânia - GO: Diário Oficial do Estado de Goiás, 1979.

JAMSHIDI, S. *et al.* Enhancement of surface water quality using trading discharge permits and artificial aeration. **Environmental Earth Sciences**, 26 nov. 2015. v. 74, n. 9, p. 6613–6623. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s12665-015-4663-5>>.

KANNEL, P. R. *et al.* A Review of Public Domain Water Quality Models for Simulating Dissolved Oxygen in Rivers and Streams. **Environmental Modeling & Assessment**, 31 abr. 2011. v. 16, n. 2, p. 183–204. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s10666-010-9235-1>>.

KIMMEL, C. B. *et al.* Stages of Embryonic Development of the Zebrafish. **Developmental dynamics**, 1995. v. 203, p. 253–310.

KNAPIK, H. G. *et al.* Qualidade da Água da Bacia do Rio Iguaçu : Diferenças Conceituais entre os Modelos QUAL2E e QUAL2K. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, 2011. v. 16, n. 2, p. 75–88.

MAGALHÃES, D. D. P.; FERRÃO, S. A Ecotoxicologia como ferramenta no biomonitoramento de ecossistemas aquáticos. **Oecologia Australis**, 2008. v. 12, n. 3, p. 355–381. Disponível em: <<http://www.oecologiaaustralis.org/ojs/index.php/oa/article/view/112/38>>.

MARTINS, F. C. O. Limnological characterization and application of DPSIR model aimed at integrated assessment of lacustrine hydrographic basins. **Ambiência**, 2016. v. 12, n. 2, p. 573–597. Disponível em: <<http://www.gnresearch.org/doi/10.5935/ambiencia.2016.02.05>>.

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

MORUZZII, R. B. *et al.* Avaliação de cargas difusas e simulação de autodepuração no córrego da Água Branca, Itirapina (SP). **Geociências**, 2012. v. 31, n. 3, p. 447–458.

NAGEL, R. DarT: The Embryo Test with the Zebrafish *Danio rerio* - a General Model in Ecotoxicology and Toxicology. **Altex**, 2002. v. 19, n. 1, p. 38–48.

OECD. **Test No. 236: Fish Embryo Acute Toxicity (FET) Test**. OECD Publishing. OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 2. [S.l.]: OECD Publishing, 2013.

Disponível em: <<http://www.oecd-ilibrary.org>>.

PANAGOPOULOS, Y.; MAKROPOULOS, C.; MIMIKOU, M. Decision support for diffuse pollution management. **Environmental Modelling and Software**, abr. 2012. v. 30, p. 57–70.

Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.envsoft.2011.11.006>>. Acesso em: 27 jun. 2016.

PARK, S. S.; LEE, Y. S. A water quality modeling study of the Nakdong River, Korea.

Ecological Modelling, jun. 2002. v. 152, n. 1, p. 65–75. Disponível em:

<<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0304380001004896>>.

PELLETIER, G. J.; CHAPRA, S. C.; TAO, H. QUAL2Kw – A framework for modeling water quality in streams and rivers using a genetic algorithm for calibration. **Environmental Modelling & Software**, mar. 2006. v. 21, n. 3, p. 419–425. Disponível em:

<<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364815205001489>>.

_____. _____. _____. **QUAL2Kw - theory and documentation (version 5.1). A modeling framework for simulating river and stream water quality**. Olympia, WA:

Department of Ecology, 2008. Disponível em:

<<http://www.ecy.wa.gov/biblio/04030??>>.

RAUTENBERG, G. E. *et al.* A multi-level approach using *Gambusia affinis* as a bioindicator of environmental pollution in the middle-lower basin of Suquíá River. **Ecological Indicators**, 2015. v. 48, n. Supplement C, p. 706–720. Disponível em:

<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1470160X14004579>>.

SARDINHA, D. De S. *et al.* Avaliação da qualidade da água e autodepuração do ribeirão do meio, Leme (SP). **Engenharia Sanitária e Ambiental**, set. 2008. v. 13, n. 3, p. 329–338.

Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1413-41522008000300013&lng=pt&nrm=iso&tlng=pt>.

SECIMA. Secretaria de Estado de Meio Ambiente, Recursos Hídricos, Infraestrutura, Cidades e Assuntos Metropolitanos. **Proposta de Instituição do Comitê de Bacia Hidrográfica do Rio dos Bois, conforme Resolução Nº 003, de 10 de Abril de 2001, do Conselho Estadual De Recursos Hídricos**. Goiânia, Brasil: SECIMA, 2003, p. 33.

_____. Secretaria de Meio Ambiente, Recursos Hídricos, Infraestrutura, Cidades e Assuntos Metropolitanos. **Instrução Normativa Nº 004/2015-GAB. Define as vazões específicas de referência Q95% para o Estado de Goiás com base em Planos de Recursos Hídricos de bacias específicas e dados hidrológicos coletados de séries históricas...** Goiânia - GO: SECIMA, 2015a.

_____. Secretaria de Estado de Meio Ambiente, Recursos Hídricos, Infraestrutura, Cidades e Assuntos Metropolitanos. **Plano Estadual de Recursos Hídricos do Estado de Goiás**. Goiânia - GO, Brasil: SECIMA, 2015b, p. 288.

_____. Secretaria de Estado de Meio Ambiente, Recursos Hídricos, Infraestrutura, Cidades e Assuntos Metropolitanos. [S.l.], 2018. Disponível em:

<<http://www.secima.go.gov.br/post/ver/198106/outorga>>. Acesso em: 13 fev. 2018.

SPERLING, M. VON. **Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos**. [S.l.]: Editora UFMG, 1996. V. 1.

_____. **Estudos e modelagem da qualidade da água de rios**. 2ª ed. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2014.

THOMANN, R.; FITZPATRICK, J. **Calibration and verification of a mathematical model**

of the eutrophication of the Potomac Estuary. DC Department of Environmental Sciences.

THOMANN, R. V; MUELLER, J. A. **Principles of surface water quality modeling and control**. [S.l.]: Harper & Row, 1987.

TUNDISI, J. G. Recursos hídricos no futuro: problemas e soluções. **Estudos Avançados**, 2008. v. 22, n. 63, p. 7–16. Disponível em:

<http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-40142008000200002&lng=pt&tlng=pt>.

_____; TUNDISI, T. M. As múltiplas dimensões da crise hídrica. **Revista USP**, 2 set. 2015. n. 106, p. 21–30. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.11606/issn.2316-9036.v0i106p21-30>>.

USEPA. **Method 3005A - Acid Digestion of Waters for Total Recoverable or Dissolved Metals for Analysis by FLAA or ICP Spectroscopy**. 1992. [S.l.]: [s.n.], 1992. Disponível em: <<https://www.epa.gov/sites/production/files/2015-12/documents/3005a.pdf>>. Acesso em: 10 ago. 2017.

_____. **Protocol for Developing Nutrient TMDLs. EPA 841-B-99-004. Office of Water (4503F). United States Environmental Protection Agency**.

ZHANG, R. *et al.* Simulation and Evaluation of Pollution Load Reduction Scenarios for Water Environmental Management: A Case Study of Inflow River of Taihu Lake, China. **International Journal of Environmental Research and Public Health**, 9 set. 2014. v. 11, n. 9, p. 9306–9324. Disponível em: <<http://www.mdpi.com/1660-4601/11/9/9306/>>.