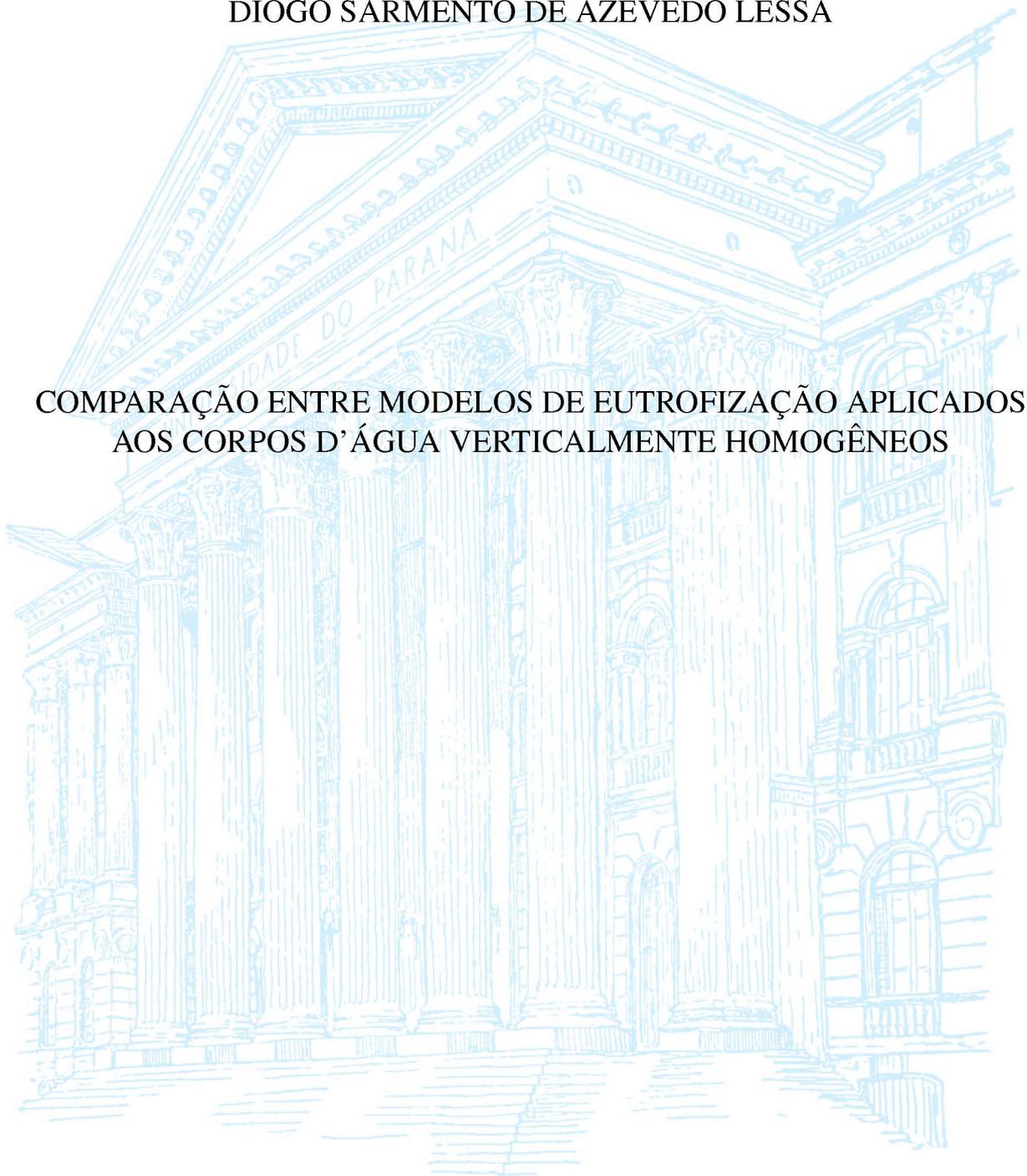


UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

DIOGO SARMENTO DE AZEVEDO LESSA

COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS DE EUTROFIZAÇÃO APLICADOS  
AOS CORPOS D'ÁGUA VERTICALMENTE HOMOGÊNEOS



CURITIBA

2018

DIOGO SARMENTO DE AZEVEDO LESSA

COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS DE EUTROFIZAÇÃO APLICADOS  
AOS CORPOS D'ÁGUA VERTICALMENTE HOMOGÊNEOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental (PPGEA), Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Ambiental.

Orientador: Cynara de Lourdes da N. Cunha

CURITIBA

2018

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR  
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

L638c

Lessa, Diogo Sarmiento de Azevedo

Comparação entre modelos de eutrofização aplicados aos corpos d'água verticalmente homogêneos [recurso eletrônico] / Diogo Sarmiento de Azevedo Lessa. – Curitiba, 2018.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, 2018.

Orientador: Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha .

1. Água – Qualidade. 2. Eutrofização. 3. Fitoplâncton. 4. Clorofila-a. 5. Carbono. I. Universidade Federal do Paraná. II. Cunha, Cynara de Lourdes da Nóbrega . III. Título.

CDD: 551.48

Bibliotecário: Elias Barbosa da Silva CRB-9/1894

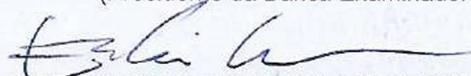
## TERMO DE APROVAÇÃO

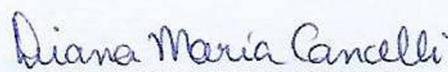
Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA AMBIENTAL da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **DIOGO SARMENTO DE AZEVEDO LESSA**, intitulada: **COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS DE EUTROFIZAÇÃO APLICADOS AOS CORPOS D'ÁGUA VERTICALMENTE HOMOGÊNEOS**, após terem inquirido o aluno e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua aprovação no rito de defesa.

A outorga do título de Mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

Curitiba, 23 de Novembro de 2018.

  
CYNARA DE LOURDES DA NÓBREGA CUNHA(UFPR)  
(Presidente da Banca Examinadora)

  
EMILIO GRACILIANO FERREIRA MERCURI(UFPR)  
(Avaliador Interno)

  
DIANA MARIA CANCELLI(ENVEX)  
(Avaliador Externo)

*“O homem vive da natureza, isto é,  
a natureza é seu corpo, e tem que  
manter com ela um diálogo ininterrupto  
se não quiser morrer. Dizer que a  
vida física e mental do homem está  
ligada à natureza significa simplesmente  
que a natureza está ligada a si mesma,  
porque o homem é parte dela.”*

*(Karl Marx – Manuscritos econômico-filosóficos)*

# RESUMO

O processo que provoca o enriquecimento de nutrientes em ambientes aquáticos é chamado de eutrofização. A eutrofização pode ser considerada como uma reação de causas e efeitos, cuja característica principal é a quebra da estabilidade entre a produção de matéria orgânica, o consumo e a decomposição. O fitoplâncton encontra-se na base da cadeia alimentar de ecossistemas aquáticos e serve de alimento a organismos maiores. O objetivo deste trabalho é investigar a influência da circulação hidrodinâmica sobre os processos de crescimento fitoplanctônico em corpos d'água e aplicar formulações para estimar a biomassa do fitoplâncton a partir dos mecanismos relacionados ao transporte, crescimento e perdas de sua biomassa, assim como sua interação com os nutrientes (nitrogênio e fósforo). Foram implementados, em um modelo bidimensional em planta, as reações cinéticas do ciclo do nitrogênio e do ciclo fósforo, utilizando como base as formulações de dois modelos: SisBaHiA<sup>®</sup> (modelo de qualidade de água) e PCLake (modelo ecológico). Os modelos propostos apresentam a concentração de fitoplâncton com o uso de distintos indicadores clorofila-*a* (SisBaHiA<sup>®</sup>) e carbono (PCLake). Um modelo concentrado apresenta que há similaridade no crescimento algal limitado pela presença de nutrientes (amônia, nitrato e fósforo inorgânico), uma vez indicada pela presença de clorofila-*a*, noutra indicada pela presença de carbono. As reações cinéticas das substâncias foram aplicadas num modelo de transporte advectivo-difusivo para corpos d'água misturados na direção vertical. As formulações que foram implementadas no modelo bidimensional indicaram que o crescimento do fitoplâncton apresenta resultados semelhantes em toda simulação.

**Palavras-chaves:** Modelo de qualidade de água. Fitoplâncton. Clorofila-*a*. Carbono.

# ABSTRACT

The process that causes enrichment of nutrients in aquatic environments is called eutrophication. Eutrophication can be considered as a reaction of causes and effects, whose main characteristic is the breakdown of the stability between the production of organic matter, the consumption and the decomposition. Phytoplankton is at the base of the food chain of aquatic ecosystems and serves as food for larger organisms. The objective of this study is to investigate the influence of hydrodynamic circulation on the phytoplankton growth processes in water bodies and to apply formulations to estimate phytoplankton biomass from the mechanisms related to transport, growth and losses of its biomass, as well as its interaction with nutrients (nitrogen and phosphorus). The kinetic reactions of the nitrogen cycle and the phosphorus cycle were implemented in a two-dimensional model, using two formulations: SisBaHiA<sup>®</sup> (water quality model) and PCLake (ecological model). The proposed models present the phytoplankton concentration with the use of different chlorophyll-*a* (SisBaHiA<sup>®</sup>) and carbon (PCLake) indicators. A concentrated model shows that there is similarity in algal growth limited by the presence of nutrients (ammonia, nitrate and inorganic phosphorus), once indicated by the presence of chlorophyll-*a*, in another indicated by the presence of carbon. The kinetic reactions of the substances were applied in an advective-diffusive transport model for water bodies mixed in the vertical direction. The formulations that were implemented in the two-dimensional model indicated that the growth of phytoplankton presents similar results in all simulation.

**Key-words:** Water quality model. Phytoplankton. Chlorophyll-*a*. Carbon.

# Lista de figuras

Figura 2.1 –Ilustração de alguns locais favoráveis à presença de fitoplâncton em um lago durante diferentes épocas do ano. . . . .	23
Figura 5.1 –Estabilização das variáveis de estado referentes ao Nitrogênio ao longo do tempo – lago Beulakerwijde. . . . .	62
Figura 5.2 –Estabilização das variáveis de estado referentes ao Fósforo ao longo do tempo – lago Beulakerwijde. . . . .	62
Figura 5.3 –Variação temporal das concentrações do fitoplâncton (indicado pela clorofila- <i>a</i> e carbono) no lago Beulakerwijde. . . . .	63
Figura 5.4 –Crescimento do fitoplâncton em função da razão entre o fósforo e a clorofila- <i>a</i> para diferentes taxas de crescimento fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer. Formulação baseada no SisBaHiA <sup>®</sup> . . . . .	64
Figura 5.5 –Crescimento do fitoplâncton em função da razão entre o fósforo e carbono para diferentes taxas de crescimento fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer. Formulação baseada no PCLake. . . . .	65
Figura 5.6 –Crescimento do fitoplâncton em função da razão entre o nitrogênio e carbono para diferentes taxas de crescimento fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer. Formulação baseada no PCLake. . . . .	66
Figura 5.7 –Estimativa das relações de massa do fitoplâncton nos lagos em estudo. . . . .	67
Figura 6.1 –Malha utilizada nas simulações. . . . .	69
Figura 6.2 –Padrão de circulação hidrodinâmico de um reservatório hipotético. . . . .	71
Figura 6.3 –Estações situadas no interior do reservatório. . . . .	71
Figura 6.4 –Tempo de residência no corpo hídrico, em horas. . . . .	72
Figura 6.5 –Distribuição espacial da concentração de nitrogênio orgânico num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHiA <sup>®</sup> , os da direita do PCLake. . . . .	74
Figura 6.6 –Distribuição espacial da concentração de nitrogênio amoniacal num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHiA <sup>®</sup> , os da direita do PCLake. . . . .	75

Figura 6.7 –Distribuição espacial da concentração de nitrato num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHiA <sup>®</sup> , os da direita do PCLake.	76
Figura 6.8 –Distribuição das concentrações de nitrogênio orgânico, amônia e nitrato em diferentes estações durante 10 dias.	77
Figura 6.9 –Distribuição espacial da concentração de fósforo orgânico num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHiA <sup>®</sup> , os da direita do PCLake.	78
Figura 6.10 –Distribuição espacial da concentração de fósforo inorgânico – ortofosfato – num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHiA <sup>®</sup> , os da direita do PCLake.	79
Figura 6.11 –Distribuição das concentrações de fósforo orgânico e fósforo inorgânico em diferentes estações durante 10 dias.	80
Figura 6.12 –Distribuição espacial da biomassa de fitoplâncton, indicado pela clorofila- <i>a</i> , num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) 6 horas; (b) 12 horas; (c) 24 horas; (d) 72 horas; (e) 120 horas e (f) 240 horas. A escala de cores indica que as células em vermelho, laranja, amarelo, verde, azul e roxo têm concentrações entre 0 $\mu\text{g.l}^{-1}$ e 1 $\mu\text{g.l}^{-1}$ .	81
Figura 6.13 –Distribuição espacial da biomassa de fitoplâncton, indicado pelo carbono, num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) 6 horas; (b) 12 horas; (c) 24 horas; (d) 72 horas; (e) 120 horas e (f) 240 horas. A escala de cores indica que as células em vermelho, laranja, amarelo, verde, azul e roxo têm concentrações entre 0 $\text{mg.l}^{-1}$ e 0,1 $\text{mg.l}^{-1}$ .	82
Figura 6.14 –Distribuição espacial da biomassa de fitoplâncton, indicado pelo carbono, segundo a equação de Chapra (Equação 4.97), num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) 6 horas; (b) 12 horas; (c) 24 horas; (d) 72 horas; (e) 120 horas e (f) 240 horas. A escala de cores indica que as células em vermelho, laranja, amarelo, verde, azul e roxo têm concentrações entre 0 $\text{mg.l}^{-1}$ e 0,14 $\text{mg.l}^{-1}$ .	83
Figura 6.15 –Distribuição temporal das concentrações de fitoplâncton, durante 10 dias, em modelos de crescimento algal com formulações distintas.	84

# Lista de tabelas

Tabela 2.1	–Nível trófico de ambientes aquáticos e os limites de fósforo inorgânico e nitrogênio inorgânico. (Adaptado de Vollenweider (1965)). . . . .	20
Tabela 2.2	–Características do fitoplâncton em lagos oligotróficos e eutróficos, segundo Rawson (1956). . . . .	25
Tabela 4.1	–Notação temporal da concentração das variáveis de estado em diferentes períodos de tempo. . . . .	37
Tabela 4.2	–Variáveis de estado simuladas pelos modelos em estudo. . . . .	41
Tabela 4.3	–Parâmetros utilizados nas equações do fitoplâncton. . . . .	43
Tabela 4.4	–Parâmetros utilizados nas equações do nitrogênio orgânico. . . . .	44
Tabela 4.5	–Parâmetros utilizados nas equações da amônia. . . . .	46
Tabela 4.6	–Parâmetros utilizados nas equações do nitrato. . . . .	48
Tabela 4.7	–Parâmetros utilizados nas equações do fósforo orgânico. . . . .	49
Tabela 4.8	–Parâmetros utilizados nas equações do fósforo inorgânico. . . . .	51
Tabela 4.9	–Parâmetros e valores utilizados nas relações entre clorofila- <i>a</i> e carbono. . . . .	53
Tabela 5.1	–Características hidráulicas do lago Beulakerwijde. . . . .	58
Tabela 5.2	–Vazões mássicas de entrada no lago Beulakerwijde. . . . .	59
Tabela 5.3	–Valores dos parâmetros utilizados no modelo baseado nas formulações do SisBaHiA <sup>®</sup> . . . . .	59
Tabela 5.4	–Valores dos parâmetros utilizados no modelo baseado nas formulações do PCLake. . . . .	60
Tabela 5.5	–Valores das razões $r_{na}$ , $r_{pa}$ , $r_{nc}$ e $r_{pc}$ para diferentes grupos de fitoplâncton discriminado por composição da sua biomassa. . . . .	67
Tabela 6.1	–Concentrações das substâncias na seção 1. . . . .	73
Tabela A.1	–Características hidráulicas dos lagos em estudo. . . . .	92
Tabela A.1	–Concentrações de entrada das variáveis de estado nos lagos em estudo. . . . .	95
Tabela B.1	–Resultado do modelo concentrado baseado nas formulações do SisBaHiA <sup>®</sup> para os lagos em estudo. . . . .	97
Tabela B.2	–Resultado do modelo concentrado baseado nas formulações do PCLake para os lagos em estudo. . . . .	99

# Lista de símbolos

$C$	Concentração da variável de interesse
$C^*$	Concentração da variável de interesse prescrita
$C_0$	Concentração calculada no ponto de contorno no instante $t_0$
$C_1$	Concentração de amônia
$C_1^{sed}$	Concentração de amônia no sedimento
$C_2$	Concentração de nitrato
$C_2^{sed}$	Concentração de nitrato no sedimento
$C_3$	Concentração de fósforo inorgânico
$C_3^{sed}$	Concentração de fósforo inorgânico no sedimento
$C_7$	Concentração de nitrogênio orgânico
$C_8$	Concentração de fósforo orgânico
$C_9$	Concentração de fitoplâncton indicado pela clorofila- <i>a</i>
$C_{10}$	Concentração de fitoplâncton indicado pelo carbono
$C_{af}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por fósforo
$C_{af1}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton pela amônia
$C_{af2}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por nitrato
$C_{Per}$	Conteúdo de carbono na matéria orgânica
$c_{tb}$	Fator de bioturbação para difusão
$c_{up}$	Capacidade máxima para consumo de fósforo
$D_{ij}$	Coefficiente de difusão turbulenta
$D_L$	Coefficiente da difusão turbulenta na direção longitudinal
$D_T$	Coefficiente da difusão turbulenta na direção transversal
$F$	Quociente entre o índice N:C e a taxa de crescimento

$f_7$	Fração de nitrogênio orgânico dissolvido na coluna d'água
$f_{DS}$	Fração de fósforo orgânico dissolvido na coluna d'água
$f_N^*$	Fluxo normal prescrito na fronteira
$f_{on}$	Fração das perdas do fitoplâncton reciclada para nitrogênio orgânico
$f_{op}$	Fração orgânica das perdas do fitoplâncton para o fósforo orgânico
$f_{\mu N}$	Função de limitação do consumo de nitrogênio
$f_{\mu P}$	Função de limitação do consumo do fósforo
$H$	Altura da coluna de água
$h_{den}$	Constante de meia saturação quadrática para desnitrificação
$H_t$	Profundidade do topo de camada de sedimento
$I$	Intensidade de luz
$J$	Taxa de assimilação corrigida
$k_{12}$	Taxa de nitrificação
$k_{2D}$	Taxa de desnitrificação do nitrato
$k_{71}$	Taxa de amonificação do nitrogênio orgânico
$k_{83}$	Taxa de mineralização
$k_{ad}$	Taxa de adsorção do ortofosfato
$k_{am}$	Constante de meia saturação para preferência de amônia
$k_{cons}$	Taxa máxima de assimilação
$k_{dif}^{NH_4}$	Constante de difusão da amônia
$k_{dif}^{NO_3}$	Constante de difusão do nitrato
$k_{dif}^P$	Constante de difusão do fósforo inorgânico
$K_e$	Taxa fotossintetizada total
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton
$k_g$	Taxa de crescimento do fitoplâncton
$k_g^{max}$	Taxa máxima de crescimento do fitoplâncton

$k_P^c$	Taxa de consumo de fósforo corrigida
$k_{ra}$	Taxa de respiração e excreção do fitoplâncton
$k'_{ra}$	Taxa de respiração celular
$k_{ra/C}$	Taxa de respiração basal por célula
$k_s$	Taxa de crescimento algal num meio saturado por nutrientes
$k'_{si}$	Constante de meia saturação da luz
$k_{sN}$	Constante de meia saturação do nitrogênio inorgânico
$k_{sN}^{NH_4}$	Constante de meia saturação da amônia
$k_{sN}^{NO_3}$	Constante de meia saturação do nitrato
$k_{sP}$	Constante de meia saturação do fósforo inorgânico
$k_{\mu N}$	Constante de meia saturação para o consumo de nitrogênio
$k_{\mu P}$	Constante de meia saturação para consumo de fósforo inorgânico
$n$	Concentração de nitrogênio total
$NE$	Número de elementos em que o domínio foi subdividido
$NN$	Número de pontos nodais em cada elemento
$P_{er}$	Mols de $NO_3$ desnitrificados por mol de carbono mineralizado
$Q$	Vazão volumétrica
$r_0$	Taxa de respiração basal
$R_c$	Reação cinética
$R_{C_1}$	Processo cinético da amônia
$R_{C_2}$	Processo cinético do nitrato
$R_{C_3}$	Processo cinético do fósforo inorgânico
$R_{C_7}$	Processo cinético do nitrogênio orgânico
$R_{C_8}$	Processo cinético do fósforo orgânico
$R_{C_9}$	Processo cinético do fitoplâncton indicado pela clorofila- <i>a</i>
$R_{C_{10}}$	Processo cinético do fitoplâncton indicado pelo carbono

$r_{ca}$	Razão entre carbono e clorofila- <i>a</i> na biomassa das algas
$r_g$	Taxa de mudança da respiração durante a fotossíntese por célula
$r_{mol}$	Razão de peso molecular entre nitrogênio e carbono
$r_{na}$	Razão nitrogênio e clorofila- <i>a</i> na biomassa das algas
$r_{na}^{max}$	Razão máxima entre nitrogênio e clorofila- <i>a</i> na biomassa das algas
$r_{na}^{min}$	Razão mínima entre nitrogênio e clorofila- <i>a</i> na biomassa das algas
$r_{nc}$	Razão nitrogênio e carbono na biomassa das algas
$r_{nc}^{max}$	Razão máxima entre nitrogênio e carbono na biomassa das algas
$r_{nc}^{min}$	Razão mínima entre nitrogênio e carbono na biomassa das algas
$r_{pa}$	Razão entre fósforo e clorofila- <i>a</i> na biomassa das algas
$r_{pa}^{max}$	Razão máxima entre fósforo e clorofila- <i>a</i> na biomassa das algas
$r_{pa}^{min}$	Razão mínima entre fósforo e clorofila- <i>a</i> na biomassa das algas
$r_{pc}$	Razão entre fósforo e carbono na biomassa das algas
$r_{pc}^{max}$	Razão máxima entre fósforo e carbono na biomassa das algas
$r_{pc}^{min}$	Razão mínima entre fósforo e carbono na biomassa das algas
$S/C$	Carbono estrutural por célula
$t$	Tempo
$U$	Componente da velocidade na direção $x$
$u_*$	Velocidade de atrito característica
$U_i$	Componente da velocidade na direção $x_i$
$V$	Componente da velocidade na direção $y$
$V_s$	Velocidade de sedimentação do fitoplâncton
$V_{s3}$	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas
$W_n$	Vazão mássica das $n$ variáveis de estado
$W_{Chl}$	Razão Carbono/clorofila- <i>a</i>
$\delta_C$	Função de peso ou ponderação

$\delta_{jk}$	Delta de Kronecker
$\Lambda_k$	Largura do filtro utilizado no modelo matemático
$\nu_{fr}$	Velocidade de precipitação do fósforo inorgânico
$\theta$	Ângulo entre a linha de corrente e o eixo das abscissas
$\epsilon$	Porosidade corrigida
$\Omega$	Domínio do modelo
$\Gamma$	Contorno do domínio
$\varphi$	Conjunto de funções de interpolação dos elementos
$\forall$	Volume

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>16</b>
<b>2</b>	<b>Fundamentação Teórica</b>	<b>19</b>
2.1	Eutrofização	19
2.1.1	O Fitoplâncton	22
<b>3</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>26</b>
3.1	SisBaHiA <sup>®1</sup>	27
3.2	PCLake	28
3.3	Modelos matemáticos aplicados à qualidade da água	29
<b>4</b>	<b>Metodologia</b>	<b>32</b>
4.1	Modelo matemático	32
4.1.1	Condições de contorno	36
4.2	Modelo numérico	37
4.2.1	Discretização temporal	37
4.2.2	Discretização espacial	38
4.3	Modelo de qualidade da água	40
4.3.1	Equações para as variáveis de estado – Fitoplâncton	41
4.3.2	Equações do ciclo do nitrogênio	43
4.3.2.1	Nitrogênio orgânico	43
4.3.2.2	Amônia	44
4.3.2.3	Nitrato	45
4.3.3	Equações do ciclo do fósforo	47
4.3.3.1	Fósforo orgânico	48
4.3.3.2	Fósforo inorgânico – Ortofosfato	49
4.4	Validação da Relação entre os indicadores de fitoplâncton	51
<b>5</b>	<b>Análise dos Parâmetros Biológicos – Modelo Concentrado</b>	<b>55</b>
5.1	Aplicação dos modelos concentrados	55
5.2	Validação do Modelo	58
5.2.1	Simulação do lago Beulakerwijde	58
5.3	Crescimento Fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer	63
5.4	Relação entre Indicadores do Fitoplâncton	66
<b>6</b>	<b>Resultados do Modelo Bidimensional</b>	<b>69</b>
6.1	Caracterização do Sistema	69

6.2	Perfil Hidrodinâmico . . . . .	70
6.3	Condições Iniciais, Condições de Contorno e Dados de Entrada . . . . .	72
6.4	Simulações do Nitrogênio e Fósforo . . . . .	73
6.4.1	Nitrogênio . . . . .	73
6.4.2	Fósforo . . . . .	77
6.5	Simulações do Fitoplâncton . . . . .	80
6.6	Estimativa de Carbono Indicando Comunidade Fitoplanctônica . . . . .	82
<b>7</b>	<b>Conclusões e recomendações . . . . .</b>	<b>85</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>87</b>
	<b>Anexos . . . . .</b>	<b>91</b>
	<b>ANEXO A Modelo concentrado – Dados de entrada . . . . .</b>	<b>92</b>
	<b>Apêndices . . . . .</b>	<b>94</b>
	<b>APÊNDICE A Modelo concentrado – Dados de entrada . . . . .</b>	<b>95</b>
	<b>APÊNDICE B Resultados dos modelos concentrados . . . . .</b>	<b>97</b>

# 1 Introdução

A evolução da humanidade, assim como de outras espécies, decorreu nas proximidades de lagos, estuários, baías, rios e regiões litorâneas pelos mais variados motivos. A água é um recurso fundamental ao desenvolvimento da humanidade devido às atividades que tornaram-se intrínsecas à vida humana. Ao longo da história, a água foi usada para higiene pessoal, dessedentação, transporte de excretas e de outros resíduos de origem antrópica. Para Carpenter et al. (1998), a medida em que a população mundial cresce, as cargas de poluentes aumentam e degradam a qualidade da água. Quando lançadas em um corpo d'água receptor, sem o devido tratamento, as cargas domésticas e industriais podem gerar problemas de saúde pública, pois essas cargas podem constituir uma fonte contínua de transmissão de doenças de veiculação hídrica.

A pressão antrópica sobre ambientes aquáticos precisa ser estudada de maneira detalhada, pois o entendimento da dinâmica desses ambientes, somadas às características locais, facilitam o desenvolvimento de propostas preventivistas que inibem mudanças significativas da estrutura trófica do meio.

A dinâmica dos ecossistemas aquáticos requer entendimento dos mais diversos processos: físicos, químicos e biológicos, o que impõe certa dificuldade na avaliação desses sistemas. Portanto, a gestão de ecossistemas é de esfera interdisciplinar, para que os mais diversos parâmetros sejam analisados e compreendidos por técnicos das mais distintas áreas, dentro da perspectiva do problema. Em prol dessa multidisciplinaridade, é fundamental adotar metodologias que quantifiquem esses processos de maneira eficaz.

Uma metodologia frequentemente adotada para estudos de ecossistemas aquáticos é a modelagem matemática, permitindo que, diversos processos possam ser quantificados. A essência integradora dos modelos matemáticos possibilita a simulação de cenários triviais aos mais complexos, alinhando como base auxiliadora às tomadas de decisão de gestores. Um exemplo de aplicação desses modelos, considerando a identificação do perfil hidrodinâmico de um dado corpo d'água, quando acoplado ao modelo de transporte de nutrientes, permite a distribuição de uma dada substância no corpo d'água.

Um dos motivos para o aumento do uso da modelagem em problemas ambientais está na representabilidade que esses modelos são capazes de produzir, resolvendo fenômenos complexos sem que precise de uma ação direta no ambiente em estudo. Outra razão é a consciência ambiental, que vem numa crescente mundial, devido a alguns episódios de uso impróprio dos recursos naturais e seu respectivo malefício à vida humana.

Há uma grande variedade de modelos matemáticos usados para representar fenômenos ambientais, dentre estes o SisBaHiA<sup>®</sup> (Sistema de Base Hidrodinâmica Ambiental),

desenvolvido pela COPPE/UFRJ, que reúne modelos computacionais que podem simular diversos problemas em corpos d'água naturais. O SisBaHiA<sup>®</sup>, através da solução do seu módulo hidrodinâmico, fornece informações acerca da posição dos dados da superfície livre e das velocidades de correntes nas três dimensões, ou duas dimensões em planta. Além disso, o SisBaHiA<sup>®</sup> conta com um módulo de qualidade da água e eutrofização que determina o transporte de substâncias em corpos d'água. O modelo de qualidade da água do SisBaHiA<sup>®</sup> pode simular temperatura, salinidade, o ciclo do oxigênio, do nitrogênio e do fósforo, além de biomassa de fitoplâncton (utilizando a clorofila-*a* como indicador) e zooplâncton. Nesse módulo, o campo de velocidades é previamente conhecido, ou seja, a variável de estado transportada é suposta passiva, pois não altera a hidrodinâmica do corpo de água receptor (ROSMAN, 2016). Portanto, a modelagem hidrodinâmica e a modelagem do transporte das substâncias são problemas desacoplados.

Além do SisBaHiA<sup>®</sup>, existem vários modelos matemáticos aplicados à qualidade da água, como por exemplo, e parte deste estudo, o PCLake. Por se tratar de um modelo ecológico, o PCLake se propõe a simular as interações entre diferentes organismos na coluna d'água. Para Janse (2005), o PCLake descreve os componentes bióticos e abióticos mais importantes de um corpo d'água completamente misturado, que compreende da superfície da água até camada aquosa acima do sedimento. O PCLake é um modelo concentrado capaz de simular os ciclos do nitrogênio, do oxigênio, da sílica e do fósforo, fitoplâncton (utilizando carbono como indicador da sua biomassa), zooplâncton, zoobentos, detritos, peixes e vegetais submersos.

Além dos modelos citados, que são os modelos utilizados como base para execução deste trabalho, outros modelos são utilizados por outros autores, como exemplo o MoHiD (Modelo Hidrodinâmico), usado em aplicações para águas rasas costeiras e estuarinas. O MoHiD integra a circulação hidrodinâmica, o transporte de sedimentos e os processos de qualidade da água, tornando-se uma ferramenta útil para simular cenários da dinâmica de diversos ecossistemas.

Outro modelo encontrado na literatura é o WASP (*Water Quality Analysis Simulation Program*). O WASP é um programa de modelagem de compartimentos para sistemas aquáticos, incluindo tanto a coluna d'água quanto a interface água-sedimento. Os processos de qualidade da água são representados em sub-rotinas que são escolhidas dentro de uma biblioteca de códigos-fonte já definidas ou escritas pelo próprio usuário (WOLL et al., 2005). Além disso, o modelo permite que o usuário possa estruturar aplicações em até três dimensões.

Os modelos estudados neste trabalho (SisBaHiA<sup>®</sup> e PCLake) são destinados a ecossistemas aquáticos verticalmente homogêneos (ou misturados verticalmente); nesses modelos as concentrações mássicas são uniformemente distribuídas na coluna d'água, não sendo possível determinar as variações ao longo da coluna d'água.

A modelagem do padrão de circulação hidrodinâmica do corpo d'água e a modelagem do transporte de substâncias são problemas desacoplados, e uma boa simulação do transporte depende de uma simulação pertinente do campo hidrodinâmico. Nesse sentido, a caracterização da circulação hidrodinâmica é essencial para o estudo do transporte e dispersão das substâncias em estudo.

Portanto, a hipótese deste trabalho é que, as regiões estagnadas podem influenciar, de forma diferente, o crescimento da biomassa fitoplanctônica, onde os nutrientes se acumulam, dependendo do indicador a ser utilizado. A utilização de modelos com distintos indicadores da biomassa fitoplanctônica (clorofila-*a* e carbono) permitirá constatar se o crescimento se dá de forma igualitária em regiões de baixa circulação e áreas com maiores fluxos.

Com base em formulações matemáticas de dois modelos (SisBaHiA<sup>®</sup> e PCLake), o objetivo do trabalho é investigar a influência da circulação hidrodinâmica sobre os processos de crescimento fitoplanctônico em corpos d'água, em especial nas regiões de estagnação, e aplicar as duas formulações para estimar a dinâmica da biomassa do fitoplâncton a partir dos mecanismos relacionados ao transporte, crescimento e perdas de sua biomassa, assim como sua interação com os nutrientes (nitrogênio e fósforo).

Além disso, o trabalho tem como objetivos específicos:

- Desenvolver modelos concentrados para investigar as reações cinéticas das variáveis de estado para os dois modelos;
- Implementar as reações das variáveis de estado em um modelo bidimensional em planta, com a coluna d'água completamente misturada na vertical, considerando os dois modelos (SisBaHiA<sup>®</sup> e PCLake);
- Aplicar o modelo bidimensional em planta em um corpo d'água com regiões de estagnação; e
- Comparar o crescimento da biomassa fitoplanctônica com distintos indicadores da sua presença.

O corpo-texto está organizado da seguinte maneira. No capítulo 2 é apresentada a fundamentação teórica. No capítulo 3 são apresentados os modelos matemáticos utilizados. No capítulo 4 é retratada a metodologia aplicada para o transporte de substâncias e para o modelo de qualidade da água (reações cinéticas). No capítulo 5 é apresentada a aplicação dos modelos concentrados, baseada nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> e do PCLake. O capítulo 6 discorre sobre a aplicação para um sistema bidimensional. E por fim, tem-se o capítulo 7 onde são apresentadas as considerações finais.

## 2 Fundamentação Teórica

Neste capítulo são apresentados alguns conceitos abordados no decorrer do texto. Inicialmente será introduzido o conceito de eutrofização, suas fontes, assim como a apresentação dos estados tróficos de ambientes aquáticos e algumas das variáveis de estado que qualificam o corpo d'água. Na sequência a definição de fitoplâncton, como é dado seu crescimento, produção primária e alguns métodos empregados para quantificação da sua biomassa são apresentados.

### 2.1 Eutrofização

No início do século passado, alguns estudos verificaram que a inserção de efluentes domésticos em lagos, assim como os oriundos de atividades agrícolas, resultava em mudanças na biota, chegando até mesmo a extinção de algumas espécies e proliferação de outras. Hasler (1947) compilou uma série de mudanças registradas por diversos autores, que tentam justificar a alteração desses corpos d'água em função de algumas atividades que possuem intervenção humana. O mesmo autor citou a importância do trabalho de Minder (1926) que observou num determinado lago em Zurique, que possuía peixes brancos (*e.g. Coregonus exiguus*), e mudou para outras espécies predominantes (*e.g. Salmo salvelinus*), diminuindo também a quantidade de pescados por hectare de espelho d'água. Edmondson, Anderson e Peterson (1956) constataram que uma espécie (*O. rubescens*) encontrada por Hasler (1947), na Suíça, também foi encontrada no lago de Washington, nos Estados Unidos. A espécie foi observada em grande quantidade durante o inverno e verão de 1955. O acréscimo significativo dessa espécie se deve aos grandes despejos ininterruptos de esgoto doméstico da cidade de Washington. Schelske e Stoermer (1971) observaram, no lago Michigan, que a alta concentração de fósforo também contribuía com a depleção da sílica ( $SiO_2$ ), uma vez que essas grandes concentrações estimulam a atividade biológica a níveis indesejáveis, desfavorecendo a divisão celular das diatomáceas (*Bacillariophyta*) através do consumo de sílica para elaboração da sua carapaça (ESTEVES, 1988). Portanto, o crescimento dessas algas não é vinculado ao crescimento natural do organismo, mas sim às altas cargas de nitrogênio e fósforo dos lançamentos de efluentes domésticos não tratados [Hasler (1947); Edmondson, Anderson e Peterson (1956); Davis (1964); Owens e Wood (1968); Imboden (1974)].

Outra forma de quantificar a poluição em lagos foi apresentada por Davis (1964), que mensurou o número de microrganismos fitoplânctônicos [conjunto de organismos aquáticos microscópicos que tem capacidade fotossintética e que vivem à deriva flutuando na

coluna d'água (FRAGOSO JR.; FERREIRA; MARQUES, 2009)] de 1919 a 1963 no lago Erie. O estudo propunha levantar as mais diversas espécies fitoplânctônicas, uma vez que estas possuem proliferações distintas ao longo do ano. De acordo com Davis (1964), a concentração de fitoplâncton aumentou severamente ao longo dos respectivos anos; a intensidade e o período das máximas concentrações anuais aumentaram; o intervalo de tempo onde ocorriam as mínimas concentrações anuais tornou-se mais curto; e as mínimas concentrações, durante o inverno, simplesmente não ocorreram em alguns dos últimos anos do trabalho.

Segundo Owens e Wood (1968), existe diferença entre a eutrofização natural, que trata-se de um processo inerente à deterioração dos corpos d'água, e a eutrofização artificial, provocado pela descarga de águas residuais domésticas e industriais, assim como do escoamento e lixiviação de terras agrícolas fortemente fertilizadas. Para Esteves (1988), a eutrofização artificial pode ser considerada como uma reação em cadeia de causas e efeitos, cuja característica principal é a quebra do equilíbrio existente entre a produção de matéria orgânica, seu consumo e decomposição (homeostasia). A partir desse desequilíbrio, o ecossistema passa a produzir mais matéria orgânica do que é capaz de consumir e decompor.

Vollenweider (1965) foi um dos precursores na caracterização dos níveis tróficos de ambientes aquáticos. Seu trabalho investigou a concentração das parcelas inorgânicas de nitrogênio, fósforo e outras substâncias em lagos italianos. Segundo o autor, o estado trófico de ambientes aquáticos é descrito em termos da atividade biológica que ocorre em função da presença de nutrientes no meio. Portanto, os estados tróficos são determinados em faixas com baixa concentração de nutrientes (oligotrófico), moderada concentração nutritiva (mesotrófico) ou elevada concentração de nutrientes (eutrófico). A quantificação dos níveis de nutrientes permite determinar o nível de produtividade desses ecossistemas em classes tróficas (Tabela 2.1).

Tabela 2.1 – Nível trófico de ambientes aquáticos e os limites de fósforo inorgânico e nitrogênio inorgânico. (Adaptado de Vollenweider (1965)).

Estado trófico	Fósforo inorgânico (mg/l)	Nitrogênio inorgânico (mg/l)
oligotrófico	0,00 - 0,01	0,0 - 0,1
oligo-mesotrófico	0,01 - 0,02	0,1 - 0,2
mesotrófico	0,02 - 0,05	0,2 - 0,5
meso-eutrófico	0,05 - 0,10	0,5 - 1,0
eutrófico	>0,10	>1,0

Para Lund (1967), a contribuição de altas cargas de nutrientes no corpo receptor pode não representar altas concentrações dos mesmos nutrientes no corpo d'água, pois alguns organismos podem utilizá-los tão rapidamente quanto esse aporte nutritivo,

mantendo assim as concentrações baixas. Isto é mais provável de ocorrer em regiões de baixa latitude, uma vez que as condições físicas desses ambientes favorecem o crescimento ativo desses organismos ao longo do ano. Em latitudes mais altas, as concentrações de nutrientes em um corpo d'água podem dar uma boa ideia da sua produtividade potencial, pois dias com menos luminosidade, e com as baixas temperaturas, limitam a absorção dos nutrientes.

Ryther e Dunstan (1971) citam alguns trabalhos que relatam que o crescimento do fitoplâncton causa a depleção simultânea de nitrato e fosfato na água do mar, além de descrever sobre a coincidência de que esses elementos estão presentes na água do mar quase nas mesmas proporções que ocorrem no fitoplâncton. Em contrapartida, Jacoby et al. (1982) observaram, ao longo do tempo, que a concentração de fósforo aumentava durante os verões, sem que houvesse aumento da carga desse nutriente num determinado corpo d'água raso. O fenômeno foi identificado ao perceber uma mudança no pH da água de forma espontânea. Através desse processo, o fósforo presente no sedimento se desprende e volta à coluna d'água.

Um dos problemas mais graves ocasionados pela eutrofização é o esgotamento do teor de oxigênio, pois quando grandes quantidades de algas morrem e ocorre a decomposição, inicia-se uma grande demanda sobre a concentração de oxigênio da água. Essas condições de baixa concentração de oxigênio podem causar mortes de peixes e mau odor. Um dos modelos precursores aplicados aos processos de qualidade da água foi o trabalho de Streeter e Phelps (1925) no rio Ohio. Esse modelo preza especialmente pela capacidade de autodepuração do oxigênio, levando em consideração a disponibilidade de dados relativos à temperatura do rio, carga orgânica e a velocidade do escoamento. Apesar de avaliar os níveis de oxigênio dissolvido em corpos d'água, o modelo de Streeter e Phelps (1925) utiliza cinética linear em corpos de geometria simples (uma dimensão), considerando escoamento permanente.

Além das concentrações de oxigênio, outros parâmetros são observados para caracterizar a qualidade da água. Para esses parâmetros (fósforo, nitrogênio, sílica, oxigênio, carbono, entre outros), assim como as concentrações de alguns organismos, Janse (2005) utiliza, como nomenclatura, “variável de estado” para se referir às substâncias ou organismos de interesse, presentes nos ecossistemas aquáticos. Portanto, a mesma terminologia foi adotada neste trabalho.

Em resposta a uma dessas variáveis de estado e a caracterização para uma boa qualidade da água, Owens e Wood (1968) argumentam que quando os corpos d'água são utilizados para fins de abastecimento, os problemas causados pelo crescimento algal precisam ser tratados. Esse crescimento também pode causar a proliferação de espécies tóxicas para o meio, ocasionando a mortalidade da biota, com mudanças marcantes na composição e funcionamento dos ecossistemas terrestres e aquáticos. Para Lindholm, Eriksson e Me-

riluoto (1989), as cianobactérias (espécie de alga tóxica) podem ocorrer em praticamente qualquer lago eutrófico.

### 2.1.1 O Fitoplâncton

O fitoplâncton encontra-se na base da cadeia alimentar dos ecossistemas aquáticos, uma vez que serve de alimento aos seus predadores e pertence ao nível trófico dos produtores. Existem variações da composição específica e da densidade das comunidades fitoplanctônicas durante o ano em um corpo d'água. Por possuir grandes variações da biomassa em função da temperatura, as variações da composição específica e da densidade desses organismos são mais evidentes em regiões temperadas que nas tropicais.

Diversos estudos mencionam as variações quantitativas e qualitativas das espécies de fitoplâncton em função das estações do ano ou em função da circulação hidrodinâmica. De acordo com Matsuoka, Goda e Naito (1986), a taxa de crescimento por parte do fitoplâncton é controlada por: luz, temperatura da água e concentração de nutrientes. Um esquema apresentado por Lindholm, Eriksson e Meriluoto (1989), exhibe os padrões de distribuição desses organismos durante várias fases de estratificação e mistura de ambientes aquáticos (Figura 2.1). Apesar deste trabalho tratar apenas das águas completamente misturadas (conforme item 7 da figura 2.1), a ilustração também representa um lago estratificado, onde é possível distinguir a densidade desses organismos sendo modificada na coluna d'água, em função da luminosidade. Nessa representação verifica-se:

1. epilímnio (camada menos densa), fitoplâncton disperso;
2. superfície da água;
3. águas calmas (águas superficiais, geralmente em estado de decomposição);
4. metalímnio ou outra camada de densidade intermediária;
5. superfície do sedimento;
6. camada mista superior durante o início do outono;
7. águas completamente misturadas (do outono a primavera); e
8. camada sob o gelo.

Confirmando com esses autores, Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009) apontam outros motivos que podem influenciar a distribuição espacial do fitoplâncton na coluna e no espelho d'água, e que são: densidade específica dos organismos, herbivoria, ondas de superfície, ondas internas, fluxo da água, radiação solar, bentos, temperatura da água

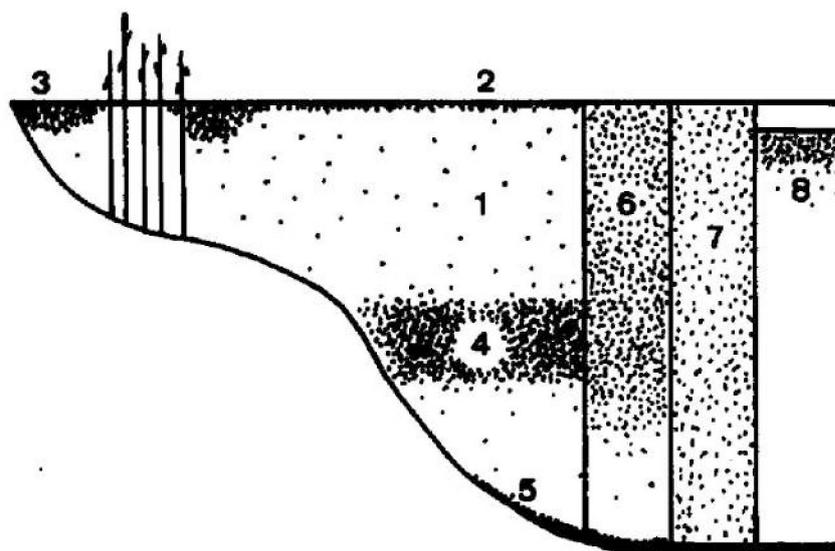


Figura 2.1 – Ilustração de alguns locais favoráveis à presença de fitoplâncton em um lago durante diferentes épocas do ano.

e turbidez. Além disso, indicam que a formação e distribuição espacial do fitoplâncton pode ser controlada por dois mecanismos: mecanismos locais (altura da coluna d'água, disponibilidade de luz, temperatura, concentrações de nutrientes e predação), os quais determinam o equilíbrio entre produção e perda da coluna d'água em uma posição espacial particular; mecanismos relacionados ao transporte, que governam a distribuição da biomassa fitoplanctônica.

Uma das maiores dificuldades no estudo desses organismos é quantificar as espécies do fitoplâncton. De acordo com Fragoso Jr., Ferreira e Marques (2009), uma aproximação mais realista pode ser feita quando o fitoplâncton é modelado através de grupos funcionais, tais como dinoflagelados, cianobactérias, diatomáceas e clorofíceas. Essa distinção é feita visando atender a diferentes características ecológicas desses grupos. Porém, por questões de simplificação, geralmente o fitoplâncton é modelado como um único grupo. Esses grupos podem ser modelados por compartimentos de peso seco (ou carbono), sílica, nitrogênio e fósforo ou indicados pela presença de clorofila-*a*. Para Esteves (1988), a biomassa desses organismos pode ser expressa em termos de indivíduos, pigmentos (clorofila-*a*), peso seco, carbono orgânico, energia etc. e aponta que, para a estimativa da biomassa fitoplanctônica, inúmeros métodos foram desenvolvidos, sendo que nenhum dos disponíveis pode ser utilizado indistintamente para todos os organismos fitoplanctônicos. Dentre os métodos destacam-se:

- **Peso seco e teor de matéria orgânica:** essa determinação é feita através da passagem da amostra em filtros de fibra de vidro previamente incinerados e pesados. Após a filtragem, o material é seco (105°C) e a biomassa é determinada por diferença de peso. A desvantagem deste método é que o material inorgânico é in-

cluído na determinação. Após a determinação do peso seco a mesma amostra pode ser incinerada (550°C) para determinação de matéria orgânica.

- **Clorofila e feopigmentos:** sendo a clorofila um dos principais responsáveis pela fotossíntese, o conhecimento de sua concentração pode dar indicações da biomassa do fitoplâncton. Uma possibilidade cada vez mais frequente é a utilização da concentração de clorofila para expressar a biomassa fitoplanctônica. Para tal, tem sido utilizado equipamentos como espectrofotômetros e fluorímetros. Para a determinação, filtra-se um volume conhecido de amostras sobre filtros especiais e a extração é feita por meio de solventes orgânicos como acetona, metanol ou éter. Após a leitura da densidade ótica das soluções contendo clorofila, calcula-se a concentração final a partir de diversas fórmulas. Frequentemente, determina-se a concentração das clorofilas-*a*, *b*, *c* e feopigmentos (produtos de degradação da clorofila) na mesma solução, utilizando-se para tanto comprimentos de ondas específicos.

A produção primária corresponde ao aumento dessa biomassa num determinado intervalo de tempo, contemplando todas as perdas ocorridas neste mesmo intervalo. Desta maneira, a produção primária é a quantidade de matéria orgânica acrescida pela fotossíntese ou quimiossíntese. Ambientes com alta produção primária, que pode ser caracterizado pela concentração de clorofila-*a*, pode comprometer a qualidade dos corpos d'água. As principais perdas de biomassa para a comunidade fitoplanctônica são: respiração, excreção, mortalidade, herbivoria, parasitismo e sedimentação.

A consequência do aumento de nutrientes para a comunidade fitoplanctônica é relacionada à densidade desses organismos, e conseqüentemente, com sua produção primária. Essa elevação substancial não implica somente no aumento da produção primária, mas também nas mudanças valorativas para essa comunidade. Portanto, para esses organismos, a inserção de nutrientes leva um aumento no número de espécies e no número de indivíduos. Além disso, o surgimento de algumas espécies ocorre em detrimento do desaparecimento de outras. Segundo Rawson (1956), a biomassa desses organismos modifica de acordo com os níveis tróficos do ambiente em estudo, e estima valores de peso seco do fitoplâncton entre de 50 – 200 kg.ha<sup>-1</sup>, em lagos eutróficos, e 10 – 30 kg.ha<sup>-1</sup> em lagos oligotróficos. Assim sendo, as características mais evidentes desse processo de eutrofização intensa traz mudanças das espécies fitoplanctônicas, como mostrado na tabela 2.2.

Karadžić et al. (2010) apresentaram resultados da análise físico-química da água, análise quali-quantitativa do fitoplâncton e estado trófico de dois reservatórios de abastecimento de água na Sérvia. A presença de seis grupos de algas, com 194 espécies, foi estabelecida para ambos os reservatórios, dentre os grupos estão: *Bacillariophyta*, *Cyanobacteria* e *Chlorophyta*. Os resultados dos testes físico-químicos de água, densidade de fitoplâncton e biomassa, bem como a concentração de clorofila-*a* mostraram alto índice

Tabela 2.2 – Características do fitoplâncton em lagos oligotróficos e eutróficos, segundo Rawson (1956).

	Oligotrófico	Eutrófico
Quantidade	Pouco	Muito
Variedade	Muitas espécies	Poucas espécies
Distribuição	Grandes profundidades	Somente na camada trofogênica
Migração diurna	Vasta	Limitada
Floração	Pouco frequente	Muito frequente
Grupos algais característicos		Cyanophyceae
	Chlorophyceae	<i>Anabaena</i>
	<i>Staurastrum</i>	<i>Aphanisomenon</i>
	Diatomaceae	<i>Microcystis</i>
	<i>Tabellaria</i>	Diatomaceae
	<i>Cyclotella</i>	<i>Melosira</i>
	Chrysophyceae	<i>Fragilaria</i>
<i>Dinobryon</i>	<i>Stephanodiscus</i>	
		<i>Asterionella</i>

de eutrofização em ambos reservatórios. Além disso, verificaram que grande parte da biomassa dessas algas podem produzir toxinas para as demais vidas aquáticas e requerem proteção ambiental apropriada a esses reservatórios. Para Fisher et al. (2009), um grande fator de interesse para os gestores dos recursos hídricos é a ocorrência de um desses fitoplânctons em específico, a cianobactéria. As florações de certos gêneros de fitoplânctons foram ligadas à alta mortalidade de peixes, à baixa concentração de oxigênio dissolvido e aos problemas de odor e gosto na água.

### 3 Revisão Bibliográfica

Os modelos matemáticos têm o propósito de representar fenômenos de interesse através de equações matemáticas (governantes). Em geral, os modelos para quantificar o padrão de circulação são denominados “modelos hidrodinâmicos” (ROSMAN, 2016). Para determinar padrões hidrodinâmicos de canais, regiões costeiras, rios, estuários, baías, entre outros, esses modelos permitem definir correntes e a elevação da superfície ao longo do domínio modelado, em função das características geométricas dos corpos d’água e dos forçantes.

Representar os processos relacionados ao crescimento algal e suas interações com os nutrientes através de modelos matemáticos, requer conhecimento da circulação hidrodinâmica. Para isso, é preciso compreender as definições e os tipos de transporte dessas substâncias. O transporte advectivo é a transferência das substâncias ocasionada pelo campo de velocidades do ambiente aquático, enquanto que o transporte difusivo se deve ao transporte de massa difundido ao gradiente de concentrações da substância no meio. Portanto, a dispersão dessas substâncias se dá através da integração espacial dos termos, ao passo que a difusão ocorre por parte da integração temporal.

O cômputo das velocidades em corpos d’água com superfície livre é determinado através do uso de modelos hidrodinâmicos. A determinação da circulação hidrodinâmica do sistema integrado a modelagem do transporte permite analisar e prever os impactos do lançamento de efluentes em determinada região.

A dimensão dos modelos varia, podendo ser unidimensionais (1D), bidimensionais em planta ou promediados verticalmente (2DH), bidimensionais em perfil ou promediados lateralmente (2DV), ou tridimensionais (3D), sendo que a escolha do modelo utilizado deve levar em consideração os fenômenos a serem investigados (JUNG, 2015). Os modelos unidimensionais são a mais simples opção para representar o escoamento e o transporte dos parâmetros de qualidade da água em rios e canais. O uso de um modelo bidimensional é possível se o problema envolve corpos d’água misturados (*e.g.* lagos rasos, estuários e reservatórios). Os modelos tridimensionais são os mais completos, porém exigem um maior esforço computacional em relação aos modelos citados. Estes modelos geralmente são usados quando existe estratificação vertical no corpo d’água.

Os motivos que levam ao uso dos modelos matemáticos aplicados à qualidade da água para Straškraba (1995) são os mesmos até os dias atuais, como:

- poluição ocasionada por excesso de matéria orgânica;
- contaminação bacteriana e viral;

- doenças por veiculação hídrica;
- contaminação por nitratos;
- eutrofização;
- acidificação;
- problemas de alta turbidez;
- salinidade;
- poluição por metal; e
- produtos químicos tóxicos, acumulados no sedimento e organismos.

Para analisar esses motivos, o uso de modelos matemáticos são desenvolvidos para auxílio do entendimento desses fenômenos. Alguns modelos são aplicados para simular variáveis de qualidade da água em rios, lagos, reservatórios, estuários e regiões costeiras.

### 3.1 SisBaHiA<sup>®</sup><sup>1</sup>

O SisBaHiA<sup>®</sup> – Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental, é um sistema de modelos computacionais para estudos e projetos em uma vasta gama de corpos de água naturais. O SisBaHiA<sup>®</sup> é registrado pela Fundação Coppetec, órgão gestor de convênios e contratos de pesquisa do COPPE/UFRJ – Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós Graduação e Pesquisa de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ).

Esse sistema tem sido continuamente aperfeiçoado na Área de Engenharia Costeira e Oceanográfica da COPPE/UFRJ desde 1987, através de teses de mestrado e doutorado, e projetos de pesquisa envolvendo modelagem de corpos de água naturais (maiores informações podem ser encontradas em [www.sisbahia.coppe.ufrj.br](http://www.sisbahia.coppe.ufrj.br)). O sistema tem sido adotado em dezenas de estudos e projetos contratados à Fundação Coppetec envolvendo modelagem de corpos de água naturais.

O SisBaHiA<sup>®</sup> resolve modelos hidrodinâmicos em modo 3D, com campo de velocidade tridimensional, ou 2DH, com dados de elevação da superfície livre e velocidades de correntes promediadas na vertical. Processos de calibração são minimizados devido a fatores como discretização espacial via elementos finitos quadráticos, permitindo ótimo mapeamento de corpos de água com linhas de costa e batimetrias complexas.

---

<sup>1</sup> O texto apresentado nesta subseção foi retirado de Rosman (2016).

O modelo hidrodinâmico utilizado pelo SisBaHiA<sup>®</sup> é otimizado para corpos d'água naturais com circulação dominada por forçantes barotrópicas, nos quais efeitos de densidade variável possam ser desprezados. A modelagem da turbulência é baseada em técnicas de filtragem semelhantes às empregadas na simulação de grandes vórtices, ou vórtices resolvíveis, para a difusão e dispersão de partículas. O sistema resolve as equações completas de Navier-Stokes considerando a aproximação de águas rasas, a aproximação de Boussinesq e a condição de fluido incompressível.

O módulo de qualidade de água é acoplado ao módulo hidrodinâmico e permite simular até 11 variáveis de estado: salinidade, temperatura, oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio (DBO), zooplâncton, clorofila-*a*, amônia, nitrato, nitrogênio orgânico, fósforo orgânico e fósforo inorgânico. Neste trabalho, os compostos de interesse são a clorofila-*a*, amônia, nitrato, nitrogênio orgânico, fósforo orgânico e fósforo inorgânico. Esses compostos são tidos como passivos, uma vez que os mesmos não interferem na circulação hidrodinâmica. As simulações dessas variáveis de estado se apropriam da mesma malha do módulo hidrodinâmico, portanto é possível utilizar as velocidades, batimetrias, velocidades do vento e outras informações, sem necessidade de uma interpolação espacial.

## 3.2 PCLake

Antes do surgimento do modelo ecológico PCLake, existiu uma série de modelos preliminares, onde a primeira versão se chamava PCLoos e foi desenvolvida por Kouwenhoven e Aldenberg (1986), mas logo em seguida passou por alterações em sua estrutura, feitas por Aldenberg (1987a), Aldenberg (1987b), Janse (1987a), Janse (1987b) e Aldenberg e Peters (1989). O modelo recebe atualizações continuamente. Todos esses formatos citados simulavam dinâmicas dos sistemas em estudo através dos ciclos do fósforo (*P*) e carbono (*C*), e admitiam as biomassas dos organismos (*e.g.* fitoplâncton, zooplâncton, zoobentos, diatomáceas, macrófitas, etc.) fossem compostas por frações de fósforo e carbono.

Diferente do SisBaHiA<sup>®</sup>, o PCLake não possui módulo hidrodinâmico, porém é capaz de simular em ecossistemas aquáticos: o ciclo do nitrogênio, do oxigênio, da sílica e do fósforo, grupos de fitoplânctons (utilizando carbono ou sílica como indicador da sua biomassa), zooplânctons, zoobentos, detritos, grupos de peixes e grupos de vegetais submersos. Portanto, é necessário um modelo hidrodinâmico que incorpore o módulo ecológico, para assim obter informação sobre a dispersão das variáveis de estado de interesse no corpo hídrico.

O módulo abiótico do PCLake descreve os ciclos globais de nutrientes para peso seco, nitrogênio, fósforo e sílica. Isso implica que a maioria dos componentes são mode-

lados em quatro unidades: peso seco (D), nitrogênio (N), fósforo (P) e sílica (S). Porém, as proporções de nutrientes para peso seco não são fixadas no modelo. Além disso, o modelo pode avaliar a quantidade de matéria orgânica e inorgânica, bem como a proporção de detritos na água e no sedimento. A biota modelada pelo PCLake é considerada por grupos funcionais. Além dos fluxos de massa, o modelo também contém algumas relações empíricas para representar alguns efeitos indiretos entre grupos de organismos. A maioria das substâncias e organismos na água, exceto grupos de peixes e macrófitas, estão sujeitos a processos de advecção e difusão.

### 3.3 Modelos matemáticos aplicados à qualidade da água

Esta seção mostra alguns trabalhos que utilizaram da ferramenta computacional (modelagem matemática) a fim de quantificar, e até mesmo prever, os processos de qualidade da água em rios, lagos, reservatórios, estuários e regiões costeiras. A importância no entendimento dos processos de eutrofização consiste em considerar as adversidades enfrentadas por organismos microbianos, assim como a dinâmica dos ciclos biogeoquímicos.

O crescimento da biomassa fitoplanctônica num ambiente eutrófico foi simulado por Tsirtsis (1995), utilizando a modelagem matemática. Através da ferramenta, Tsirtsis (1995) conseguiu reproduzir, num ambiente marinho, padrões de crescimento em função da radiação solar. Um padrão geral de valores baixos no inverno, onde há baixa incidência da radiação solar, e maiores no verão foi computado para o fitoplâncton, onde esse crescimento da biomassa se deu através da indicação do organismo por carbono.

Muitos dos trabalhos empenham-se em quantificar o crescimento algal em função de nutrientes, porém sem considerar a interação com organismos predadores. A interação entre fitoplâncton e zooplâncton (predador) foi simulada por Ikeda e Adachi (1978), que construíram um modelo dinâmico de qualidade da água. O intuito do trabalho foi recolher informações e implementar possíveis políticas de manejo relacionadas ao controle da quantidade e qualidade da água. Os principais nutrientes, nitrogênio e fósforo, foram levados em conta e utilizados como principais estimulantes do crescimento fitoplanctônico. As relações entre presa e predador foram obtidas pelo modelo, assim como suas variações sazonais.

Por outro lado, Sagehashi, Sakoda e Suzuki (2001) construíram um modelo ecológico aplicado no lago Balaton, que incluíam grupos de algas, zooplânctons e peixes. Com intuito de identificar a maneira mais efetiva de restaurar o estado trófico, os autores identificaram que uma redução nas cargas de fósforo retardaria o crescimento de algas. Shan, Wang e Shen (2009) confirmaram que o problema da eutrofização em lagos pode ser resolvido por biorremediação.

No reservatório de Danjiangkou, na China, Chen, Yang e Liu (2016) desenvolveram um modelo para identificar áreas de potenciais florações de algas. Para isso, construíram um modelo de eutrofização acoplado um modelo hidrodinâmico e de transporte tridimensional (3D) para o reservatório. O modelo simulava oxigênio dissolvido, amônia, nitrogênio total, fósforo total e clorofila-*a*. Com intuito de identificar áreas com potencial floração algal, o modelo simulou os padrões hidrodinâmicos do corpo d'água, assim como padrões espaciais e temporais do estado trófico. Para esses autores, os resultados foram úteis para o gerenciamento da qualidade da água no reservatório.

Para investigar a causa de uma intensa eutrofização, Li-kun et al. (2017) desenvolveram um modelo hidrológico e de eutrofização bidimensional (2D). O modelo propôs simular as interações entre nutrientes, fitoplâncton e zooplâncton, através das seguintes substâncias: oxigênio dissolvido, amônia, nitrato, fosfato e clorofila-*a*; simulando também a carga de nutrientes oriundo do escoamento da água da chuva e sua influência nos processos de crescimento algal e na qualidade da água. Durante o período de simulação, o modelo computou que nas partes mais próximas a superfície do corpo d'água haviam concentrações maiores que no interior do lago. De acordo com Li-kun et al. (2017) e Salvador e Bersano (2017), corpos d'água, no geral, são vulneráveis à influência do escoamento das águas da chuva.

Além disso, os modelos utilizados como base para as formulações de qualidade da água presentes neste trabalho foram utilizados em alguns outros estudos, como por exemplo Cunha et al. (2006) que aplicaram um modelo hidrodinâmico junto a um módulo de qualidade da água acoplado para simular a poluição na baía de Sepetiba. Na simulação, a concentração de oxigênio dissolvido e a demanda bioquímica de oxigênio (DBO) são usadas como indicadores para a presença de matéria orgânica no corpo d'água e como parâmetros para avaliação da poluição ambiental de parte da baía. O modelo é indicado para avaliar o impacto ambiental dos efluentes de esgoto na baía de Sepetiba a partir das cargas dos rios, também indicado para avaliar a viabilidade de diferentes esquemas de tratamento desses efluentes e desenvolver atividades de monitoramento específicas; porém o trabalho não se atenta ao crescimento algal que pode ser impulsionado a essas cargas de esgoto.

Ainda utilizando o SisBaHiA<sup>®</sup>, Cunha, Scudelari e Carrer (2018) estudaram a circulação hidrodinâmica para auxiliar na compreensão da distribuição de poluentes em corpos d'água. O trabalho buscou analisar a renovação dos corpos d'água que apresentam distintos padrões de circulação. Além disso, as diferentes escalas temporais e espaciais que relacionam a capacidade de renovação foram expressas pelo tempo de residência, pela taxa de renovação e pela idade da água. Os experimentos foram simulados para diferentes forçantes, vento e aporte fluvial e os resultados mostraram que, comparando os cenários com e sem vento, foi possível afirmar que o aporte fluvial é o forçante mais importante

no processo de renovação das águas. O trabalho não propôs a simulação do fitoplâncton.

Utilizando o PCLake, e com objetivo de reproduzir o ciclo geral de nutrientes em lagos rasos, verticalmente homogêneos, e explorar condições em que algumas medidas de restauração podem ter efeito sob remediações da área de interesse, Janse, Donk e Gulati (1995) combinaram a abordagem da rede alimentar de organismos com os ciclos de fósforo e nitrogênio. O modelo foi aplicado no lago Zwemlust, com finalidade de obter uma melhor visão em função da biomanipulação (retirada de peixes do lago, esvaziamento do lago e inserção de outros microrganismos), em contrapartida o modelo não verifica a posição espacial em que há acúmulos de nutrientes no interior do lago.

Fragoso Jr. et al. (2009) desenvolveram o IPH-TRIM3D-PCLake. Este modelo consiste em um módulo hidrodinâmico tridimensional (TRIM3D) juntamente com o modelo ecológico PCLake. O modelo ecológico é adaptado para ecossistemas subtropicais e incorporado no modelo hidrodinâmico tridimensional. O modelo descreve os componentes hidrodinâmicos, bióticos e abióticos mais importantes na água e sedimentos de um ecossistema aquático.

## 4 Metodologia

A modelagem matemática é utilizada a fim de determinar o crescimento do fitoplâncton em função da assimilação de nutrientes. Além disso, são verificadas as zonas ótimas para o crescimento algal para um corpo d'água. Dentro deste contexto, é aplicado um modelo de transporte euleriano advectivo-difusivo integrado na vertical, para escalares passivos e não-conservativos. Neste tipo de modelo, o campo de velocidades é conhecido, portanto a substância transportada não altera a hidrodinâmica do corpo d'água receptor.

Os termos do modelo matemático referente aos processos de reação são tema principal deste trabalho. O modelo hidrodinâmico utilizado é capaz de representar o padrão de circulação dos cenários propostos e é descrito detalhadamente por Rosman (2016). A partir da definição do padrão hidrodinâmico é que se aplica o modelo de transporte das substâncias em estudo.

Sendo assim, um modelo que descreve o transporte advectivo e difusivo, os componentes bióticos e abióticos, em ecossistemas aquáticos, foi desenvolvido em linguagem FORTRAN (*IBM Mathematical FORMula TRANslation System*). Este modelo tem como base as formulações das reações cinéticas do SisBaHiA<sup>®</sup> e do PCLake, destacando que não são usados os respectivos programas, apenas são utilizadas as formulações das reações cinéticas. Para cada modelo de referência (SisBaHiA<sup>®</sup> e PCLake) foi desenvolvido um novo código.

As variáveis de estado modeladas são: fitoplâncton (utilizando a clorofila-*a* ou o carbono como indicador da sua biomassa), nitrogênio orgânico, amônia, nitrato, fósforo orgânico e fósforo inorgânico. As próximas seções deste capítulo descrevem detalhadamente a construção dos modelos propostos. Iniciando com a apresentação do modelo matemático de transporte advectivo-difusivo, acompanhado na sequência do método numérico utilizado para resolução dessas equações. Como item deste capítulo são apresentadas as reações cinéticas das variáveis de estado em estudo, e por fim as relações dos indicadores da presença de fitoplâncton (clorofila-*a* e carbono).

### 4.1 Modelo matemático

O modelo utilizado para simular o transporte advectivo-difusivo e as reações das variáveis de estado em ambientes aquáticos usa os dados da circulação hidrodinâmica. O modelo de qualidade da água e de eutrofização é um modelo de transporte euleriano advectivo-difusivo integrado na vertical, para escalares que sofrem modificação de concentração através de processos físicos, químicos e biológicos. Em relação aos mecanismos

de transporte de uma substância em um corpo d'água, o processo advectivo é dominante, sugerindo assim uma dependência entre a simulação hidrodinâmica e o processo de transporte. No entanto, os processos difusivos também possuem sua parcela de contribuição na definição do transporte (ROSMAN, 2016). A integração na direção vertical indica que este modelo deve ser aplicado em ambientes aquáticos que possuem a coluna d'água bem misturada, onde inexistem estratificações verticais ou esta estratificação é pouco relevante (FRANZ, 2010).

No modelo proposto, a equação de transporte (equação 4.1) é resolvida seis vezes, uma vez para cada variável de estado; porém, como há comparação entre dois modelos, essa equação será calculada doze vezes ou seis vezes para cada modelo.

A equação integrada na direção vertical, descrevendo o transporte de um escalar para variáveis de grande escala e usando a técnica de filtragem para a modelagem da difusão turbulenta é dada por (ROSMAN, 2016):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( H \left[ D_{ij} \delta_{jk} + \frac{\Lambda_k^2}{12} \left| \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right| \right] \frac{\partial C}{\partial x_k} \right) \pm \sum R_c \quad (4.1)$$

onde  $C$  é a concentração da variável de interesse,  $U_i$  são as componentes da velocidade na direção  $x_i$  integradas na direção vertical,  $H$  é a altura da coluna d'água,  $D_{ij}$  é o tensor que representa o coeficiente de difusão turbulenta de massa ( $i, j = 1, 2$ ),  $\delta_{jk}$  representa o delta de Kronecker,  $\Lambda_k = \alpha_k \Delta x_k$  é a largura do filtro na dimensão  $x_k$ , sendo  $\alpha_k$  um parâmetro de escala ( $k = 1, 2, 3$ , onde  $k = 3$  corresponde ao tempo  $t$ ) e  $\sum R_c$  são as reações cinéticas de produção e consumo das variáveis de estado.

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

$$D_{xx} = D_L \cos^2 \theta + D_T \sin^2 \theta \quad (4.2)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (D_L - D_T) \sin \theta \cos \theta \quad (4.3)$$

$$D_{yy} = D_L \sin^2 \theta + D_T \cos^2 \theta \quad (4.4)$$

onde  $D_L$  e  $D_T$  são, respectivamente, os coeficientes nas direções longitudinal e transversal e  $\theta$  é o ângulo entre a linha de corrente e o eixo das abscissas. O coeficiente de mistura turbulenta transversal é 40 vezes menor que o longitudinal devido, principalmente, ao fato de que os gradientes de mistura transversais são muito menores que os gradientes longitudinais. Fischer et al. (1979) parametrizaram esses coeficientes da seguinte forma:

$$D_L = \alpha(5,93|u_*|H) \quad (4.5)$$

$$D_T = \beta(0,15|u_*|H) \quad (4.6)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são parâmetros incluídos para facilitar a calibração e  $u_*$  é a velocidade de atrito característica. Voltando à equação 4.1 e expandindo as derivadas (ROSMAN, 2016), obtém-se:

$$\begin{aligned} & (1 - u_{xt} - v_{yt}) \frac{\partial C}{\partial t} + (U - u_{xx} - v_{yx}) \frac{\partial C}{\partial x} + (V - u_{xy} - v_{yy}) \frac{\partial C}{\partial y} \\ &= \frac{T_{xx}}{H} \frac{\partial C^2}{\partial x^2} + \frac{T_{xy}}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{T_{xt}}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial C}{\partial t} \right) + \frac{T_{yx}}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{T_{yy}}{H} \frac{\partial C^2}{\partial y^2} + \frac{T_{yt}}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial C}{\partial t} \right) + \sum R_c \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde  $U$  e  $V$  são as componentes da velocidade na direção  $x$  e  $y$ , respectivamente, e:

$$T_{xx} = H \left[ D_{xx} + \frac{\Lambda_x^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial x} \right| \right] \quad (4.8)$$

$$T_{xy} = H \left[ D_{xy} + \frac{\Lambda_y^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \right] \quad (4.9)$$

$$T_{xt} = H \frac{\Lambda_t^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial t} \right| \quad (4.10)$$

$$T_{yx} = H \left[ D_{yx} + \frac{\Lambda_x^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \right] \quad (4.11)$$

$$T_{yy} = H \left[ D_{yy} + \frac{\Lambda_y^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial y} \right| \right] \quad (4.12)$$

$$T_{yt} = H \frac{\Lambda_t^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial t} \right| \quad (4.13)$$

$$u_{xx} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left( H \left[ D_{xx} + \frac{\Lambda_x^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial x} \right| \right] \right) \quad (4.14)$$

$$u_{xy} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left( H \left[ D_{xy} + \frac{\Lambda_y^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \right] \right) \quad (4.15)$$

$$u_{xt} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left( H \frac{\Lambda_t^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial t} \right| \right) \quad (4.16)$$

$$u_{yx} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left( H \left[ D_{yx} + \frac{\Lambda_x^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \right] \right) \quad (4.17)$$

$$u_{yy} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left( H \left[ D_{yy} + \frac{\Lambda_y^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial y} \right| \right] \right) \quad (4.18)$$

$$u_{yt} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left( H \frac{\Lambda_t^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial t} \right| \right) \quad (4.19)$$

Na equação 4.7, as velocidades  $u_{xx}$ ,  $u_{xy}$ ,  $u_{xt}$ ,  $u_{yx}$ ,  $u_{yy}$  e  $u_{yt}$  são conhecidas como “velocidades difusivas”, e representam a parcela referente às misturas difusivas.

Considerando que as reações cinéticas das variáveis de estado em estudo são de ordem um e ordem zero, podendo ser escritas como  $\sum R_c = K_1 C + K_2$ , sendo  $K_1$  e  $K_2$  constantes de decaimento ou de crescimento, dependendo do sinal considerado, tem-se então a equação de transporte de um escalar dada por:

$$\begin{aligned} P_t \frac{\partial C}{\partial t} + P_x \frac{\partial C}{\partial x} + P_y \frac{\partial C}{\partial y} = P_{xx} \frac{\partial C^2}{\partial x^2} + P_{yy} \frac{\partial C^2}{\partial y^2} + P_{xy} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial C}{\partial y} \right) \\ + P_{yx} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right) + P_{xt} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial C}{\partial t} \right) + P_{yt} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial C}{\partial t} \right) + K_1 C + K_2 \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde:

$$P_t = 1 - u_{xt} - v_{yt} \quad (4.21)$$

$$P_x = (U - u_{xx} - v_{yx}) \quad (4.22)$$

$$P_y = (V - u_{xy} - v_{yy}) \quad (4.23)$$

$$P_{xx} = \frac{T_{xx}}{H} \quad (4.24)$$

$$P_{xy} = \frac{T_{xy}}{H} \quad (4.25)$$

$$P_{xt} = \frac{T_{xt}}{H} \quad (4.26)$$

$$P_{yx} = \frac{T_{yx}}{H} \quad (4.27)$$

$$P_{yy} = \frac{T_{yy}}{H} \quad (4.28)$$

$$P_{yt} = \frac{T_{yt}}{H} \quad (4.29)$$

### 4.1.1 Condições de contorno

Para que o problema definido pela equação 4.20 seja bem posto, é necessário estabelecer condições prévias favoráveis a sua resolução (condições iniciais e de contorno). No modelo de transporte tem-se as condições de contorno de terra e aberto. Em todos estes contornos há condição de fluxo advectivo e difusivo segundo a direção normal. De acordo com Cunha, Monteiro e Rosman (2002), esta condição pode ser escrita como:

$$f_N^* = U_N C - \left( D_N + \frac{\Lambda_N^2}{12} \left| \frac{\partial U_N}{\partial x_N} \right| \right) \frac{\partial C}{\partial x_N} \quad (4.30)$$

onde o subscrito  $N$  representa a direção normal e  $f_N^*$  o fluxo normal prescrito na fronteira.

Em geral, ao longo dos contornos de terra,  $U_N$  e  $f_N^*$  são nulos em todos os nós. Neste caso, a equação resolvida nos nós de contorno de terra será:

$$\frac{\partial C}{\partial x_N} = 0 \quad (4.31)$$

Por outro lado, nas circunstâncias em que o contorno possui  $U_N$  e  $f_N^*$  diferentes de zero, ou seja, situações em que há fluxo de entrada ou saída nos limites geométricos do volume de controle, a condição de contorno adotada é:

$$f_N^* = U_N C \quad (4.32)$$

Ao longo da fronteira aberta é usual desconsiderar o fluxo difusivo. Quando o transporte é para fora do domínio, o modelo resolve somente os termos advectivos, desprezando os termos difusivos, como apresentado na equação 4.33:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \sum R_c \quad (4.33)$$

Ainda, nas fronteiras abertas, e no caso de afluxo, quando a substância ingressa no domínio, a seguinte condição é considerada (ROSMAN, 2016):

$$C = C_o + \frac{C^* - C_o}{2} \left[ 1 - \cos \left( \frac{\pi(t - t_o)}{\tau} \right) \right] \quad (4.34)$$

enquanto  $(t - t_o) \leq \tau$ .

$$C = C^* \quad (4.35)$$

quando  $(t - t_o) > \tau$ .

Da equação 4.34,  $C^*$  representa o valor da concentração prescrita,  $C_o$  o valor da concentração calculada no ponto de contorno no instante  $t_o$ , ou seja, no momento

de inversão da situação de efluxo para afluxo e  $\tau$  é o período de transição, dado pelo modelador.

## 4.2 Modelo numérico

O método numérico utilizado para o modelo de transporte usa da técnica de elementos finitos na discretização espacial e de diferenças finitas na discretização temporal. Para isso, escreve-se a equação na formulação residual ponderada e depois discretiza-se a equação temporalmente (CUNHA; MONTEIRO; ROSMAN, 2002).

A formulação residual ponderada da equação de transporte pode ser escrita como:

$$\int_{\Omega} \left[ \left( P_t \frac{\partial C}{\partial t} + P_x \frac{\partial C}{\partial x} + P_y \frac{\partial C}{\partial y} - K_1 C - K_2 \right) \delta C + \left( P_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + P_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} + P_{xt} \frac{\partial C}{\partial t} \right) \frac{\partial \delta C}{\partial x} + \left( P_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} + P_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + P_{yt} \frac{\partial C}{\partial t} \right) \frac{\partial \delta C}{\partial y} \right] d\Omega - \int_{\Gamma} f_N^* \delta C d\Gamma = 0 \quad (4.36)$$

onde  $\delta C$  é a função de peso ou ponderação,  $\Omega$  representa o domínio do modelo,  $\Gamma$  o contorno do domínio e  $f_N^*$  o fluxo na direção normal. Deve-se ter em mente que a condição de contorno essencial é representada pela prescrição da concentração e que o fluxo representa a condição de contorno natural.

### 4.2.1 Discretização temporal

Tendo como objetivo a obtenção da versão discretizada no tempo da equação de transporte, a notação da concentração em função do tempo é definida na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Notação temporal da concentração das variáveis de estado em diferentes períodos de tempo.

Valores em $t$ :	$C(x, y, t)$	$C$
Valores em $t + \Delta t$ :	$C(x, y, t + \Delta t)$	$C^{n+1}$
Valores interpolados no tempo $t + \Delta t/2$ :	$C(x, y, t + \Delta t/2)$	$C^{\otimes}$

Aplicando o método do fatoramento implícito (CUNHA, 2000 apud CUNHA; MONTEIRO; ROSMAN, 2002), pode-se obter a discretização temporal da equação de transporte (equação 4.36), apresentada a seguir:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left[ \left( 2 \frac{P_t^{\otimes}}{\Delta t} C^{m+1} + P_{x_i}^{\otimes} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial x_i} + K_1 C^{m+1} + K_2 \right) \delta C \right. \\
& \quad \left. + \left( P_{x x_i}^{\otimes} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial x_i} + \frac{2 P_{x t}^{\otimes}}{\Delta t} C^{m+1} \right) \frac{\partial \delta C}{\partial x} + \left( P_{y x_i}^{\otimes} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial x_i} + \frac{2 P_{y t}^{\otimes}}{\Delta t} C^{m+1} \right) \frac{\partial \delta C}{\partial y} \right] d\Omega \\
& \quad = \int_{\Omega} \left[ \left( 2 \frac{P_t^{\otimes}}{\Delta t} C^m - P_{x_i}^{\otimes} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial x_i} \right) \delta C \right. \\
& \quad \left. - \left( P_{x x_i}^{\otimes} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial x_i} + \frac{2 P_{x t}^{\otimes}}{\Delta t} C^m \right) \frac{\partial \delta C}{\partial x} - \left( P_{y x_i}^{\otimes} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial x_i} - \frac{2 P_{y t}^{\otimes}}{\Delta t} C^m \right) \frac{\partial \delta C}{\partial y} \right] d\Omega - \int_{\Gamma} f_N^* \delta C d\Gamma = 0 \\
& \quad \quad \quad i = 1, 2 \quad (4.37)
\end{aligned}$$

onde:

$$P_x^{\otimes} = U^{\otimes} - \frac{1}{H^{\otimes}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ H^{\otimes} \left( D_{x_i x}^{\otimes} + \frac{\Lambda_x^2}{12} \left| \frac{\partial U_i^{\otimes}}{\partial x} \right| \right) \right] \quad (4.38)$$

$$P_y^{\otimes} = V^{\otimes} - \frac{1}{H^{\otimes}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ H^{\otimes} \left( D_{x_i y}^{\otimes} + \frac{\Lambda_y^2}{12} \left| \frac{\partial U_i^{\otimes}}{\partial y} \right| \right) \right] \quad (4.39)$$

$$P_t^{\otimes} = 1 - \frac{1}{H^{\otimes}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ H^{\otimes} \frac{\Lambda_t^2}{12} \left| \frac{\partial U_i^{\otimes}}{\partial t} \right| \right] \quad (4.40)$$

$$P_{xx}^{\otimes} = D_{xx}^{\otimes} + \frac{\Lambda_x^2}{12} \left| \frac{\partial U^{\otimes}}{\partial x} \right| \quad (4.41)$$

$$P_{yy}^{\otimes} = D_{yy}^{\otimes} + \frac{\Lambda_y^2}{12} \left| \frac{\partial V^{\otimes}}{\partial y} \right| \quad (4.42)$$

$$P_{xy}^{\otimes} = D_{xy}^{\otimes} + \frac{\Lambda_y^2}{12} \left| \frac{\partial U^{\otimes}}{\partial y} \right| \quad (4.43)$$

$$P_{yx}^{\otimes} = D_{yx}^{\otimes} + \frac{\Lambda_x^2}{12} \left| \frac{\partial V^{\otimes}}{\partial x} \right| \quad (4.44)$$

$$P_{xt}^{\otimes} = \frac{\Lambda_t^2}{12} \left| \frac{\partial U^{\otimes}}{\partial t} \right| \quad (4.45)$$

$$P_{yt}^{\otimes} = \frac{\Lambda_t^2}{12} \left| \frac{\partial V^{\otimes}}{\partial t} \right| \quad (4.46)$$

## 4.2.2 Discretização espacial

De acordo com Cunha, Monteiro e Rosman (2002), na discretização espacial são empregados elementos finitos quadráticos Lagrangeanos subparamétricos, sendo a geometria do elemento representada por polinômios Lagrangeanos lineares, enquanto a concentração e os parâmetros do domínio são definidos por polinômios Lagrangeanos quadráticos.

Os elementos utilizados são os quadrangulares de 9 nós. As funções de ponderação desses elementos, em coordenadas locais  $(\xi, \eta)$ , ou o conjunto de funções quadráticas é dado por:

$$\varphi_1 = \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 - \eta) \quad (4.47)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 - \eta) \quad (4.48)$$

$$\varphi_3 = \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 + \eta) \quad (4.49)$$

$$\varphi_4 = \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 + \eta) \quad (4.50)$$

$$\varphi_5 = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(\eta^2 - \eta) \quad (4.51)$$

$$\varphi_6 = \frac{1}{2}(\xi^2 + \xi)(1 - \eta^2) \quad (4.52)$$

$$\varphi_7 = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(\eta^2 + \eta) \quad (4.53)$$

$$\varphi_8 = \frac{1}{2}(\xi^2 - \xi)(1 - \eta^2) \quad (4.54)$$

$$\varphi_9 = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2) \quad (4.55)$$

Aplicando a formulação de Galerkin para a equação de transporte e considerando  $\varphi$  o conjunto de funções de interpolação dos elementos, os termos da equação podem ser escritos para cada nó  $\varphi$  como:

$$\sum_{e=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NN} (W_{ij} C_j^{n+1}) = \sum_{e=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NN} (Z_{ij} C_{ij}) + \sum_{e=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NN} (T_{ij}) + (f_N^{*n=1} + f_N^{*n})_j \int_{\Gamma} \varphi_i \varphi_j d\Gamma \quad (4.56)$$

onde:

$$W_{ij} = (A + B + C + D + E + F + G + H + I - J)_{ij} \quad (4.57)$$

$$Z_{ij} = (A - B - C - D - E + F - G - H + I)_{ij} \quad (4.58)$$

sendo estas matrizes definidas como:

$$A_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \frac{2}{\Delta t} \varphi_i \varphi_j \sum_{k=1}^{NN} P_{t_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.59)$$

$$B_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \sum_{k=1}^{NN} P_{x_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.60)$$

$$C_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \sum_{k=1}^{NN} P_{y_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.61)$$

$$D_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \sum_{k=1}^{NN} P_{xx_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.62)$$

$$E_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \sum_{k=1}^{NN} P_{xy_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.63)$$

$$F_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \frac{2}{\Delta t} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \varphi_j \sum_{k=1}^{NN} P_{xt_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.64)$$

$$G_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \sum_{k=1}^{NN} P_{yx_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.65)$$

$$H_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \sum_{k=1}^{NN} P_{yy_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.66)$$

$$I_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( \frac{2}{\Delta t} \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \varphi_j \sum_{k=1}^{NN} P_{yt_k}^{\otimes} \varphi_k \right) d\Omega_e \quad (4.67)$$

$$J_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( K_1 \varphi_i \varphi_j \right) d\Omega_e \quad (4.68)$$

$$T_{ij} = \int_{\Omega_e} \left( K_2 \varphi_i \varphi_j \right) d\Omega_e \quad (4.69)$$

onde  $NE$  representa o número de elementos em que o domínio foi subdividido, já  $NN$  o número de pontos nodais de cada elemento, no caso 9, já que foram implementados elementos quadrangulares.

Conforme Cunha, Monteiro e Rosman (2002), o sistema mostrado na equação 4.56 é resolvido através do método iterativo de solução GMRES (*Generalized Minimum Residual Method*), usando preconditionadores do tipo ILUT (*Incomplete LU factorization with dual truncation strategy*).

### 4.3 Modelo de qualidade da água

No modelo de qualidade da água usado neste trabalho, o campo de velocidades é conhecido, ou seja, a substância modelada não interfere na hidrodinâmica do corpo d'água receptor. A decorrência dessa ideia inicial torna o padrão hidrodinâmico e a modelagem dos poluentes, e suas respectivas interações, problemas totalmente desacoplados.

A distribuição das variáveis de estado ao longo do corpo receptor é realizada através dos mecanismos de transporte advectivo e difusivo. Além disso, o modelo de qualidade da água conta um dispositivo de reações cinéticas, onde cada variável de estado possui processos de ganho e perda da sua respectiva massa. Na modelagem das reações com base no SisBaHiA<sup>®</sup>, a presença do fitoplâncton é indicada através da concentração de clorofila-*a*, já para a modelagem das reações com base no PCLake essa relação com o fitoplâncton é dada através do carbono (Tabela 4.2).

Tabela 4.2 – Variáveis de estado simuladas pelos modelos em estudo.

Variáveis de estado	Símbolo
Amônia	$C_1$
Nitrato	$C_2$
Fósforo inorgânico	$C_3$
Nitrogênio orgânico	$C_7$
Fósforo orgânico	$C_8$
Fitoplâncton - indicado pela clorofila- <i>a</i> <sup>(1)</sup>	$C_9$
Fitoplâncton - indicado pelo carbono <sup>(2)</sup>	$C_{10}$

(1) simulado com base nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup>

(2) simulado com base nas formulações do PCLake

Muitos dos parâmetros relacionados as reações cinéticas variam de acordo com a temperatura do meio aquoso e/ou com a luminosidade solar. Como essas condições só tem papel importante na intensificação ou retardamento dos processos cinéticos supõe-se que os corpos receptores possuem temperaturas constantes a 20°C (temperatura de referência), como também recebem luminosidade com veemência por toda a coluna d'água. Além disso, os termos relacionados a ressuspensão dessas variáveis, causada pelo vento, a predação do fitoplâncton e interações com outros organismos foram desprezados. Estas considerações são utilizadas em todas as simulações realizadas.

As próximas seções descrevem as reações cinéticas ( $R_{C_1}, R_{C_2}, R_{C_3}, R_{C_7}, R_{C_8}, R_{C_9}$  e  $R_{C_{10}}$ ) utilizadas para quantificar as variáveis de estado baseadas nas formulações dos modelos em estudo. A apresentação destas formulações identificará cada processo envolvido na variável de estado e seguirá a seguinte ordem: formulação dessas variáveis utilizada com base no SisBaHiA<sup>®</sup> seguida da respectiva formulação com base no PCLake. Para unificar as distintas notações foi adotado como base instrutiva as notações do modelo SisBaHiA<sup>®</sup>.

### 4.3.1 Equações para as variáveis de estado – Fitoplâncton

O crescimento do organismo, definido através do parâmetro  $k_g$ , é limitado à disponibilidade de nutrientes. Neste modelo, apenas o fósforo inorgânico (ortofosfato) e o

nitrogênio inorgânico foram considerados como nutrientes responsáveis pelo crescimento do fitoplâncton.

A taxa de respiração e excreção foi combinada num único termo  $k_{ra}$  que inclui todas as perdas por processos metabólicos e de excreção no fitoplâncton. Além de representarem perdas da biomassa de algas, a respiração e excreção são componentes importantes na reciclagem de nutrientes.

A taxa de sedimentação do fitoplâncton depende da sua densidade, tamanho, forma e estado fisiológico das suas células, da viscosidade e densidade da água, e da turbulência e padrão de circulação hidrodinâmico (ROSMAN, 2016). O valor da velocidade de sedimentação  $V_s$  utilizado neste modelo é constante, sendo considerado como um parâmetro de calibração.

Para as reações baseadas nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup>, a equação que expressa as reações de produção e consumo do fitoplâncton, indicada pela clorofila-*a*, é dada por:

$$R_{C_9} = \underbrace{k_g C_9}_{\text{crescimento}} - \underbrace{k_{ra} C_9}_{\text{respiração e excreção}} - \underbrace{k_{ea} C_9}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{\frac{V_s}{H} C_9}_{\text{sedimentação}} \quad (4.70)$$

onde os efeitos de cada nutriente, para o crescimento, foram combinados através do mínimo fator limitante.

$$k_g = k_g \min \left( \frac{C_1 + C_2}{k_{sN} + C_1 + C_2}; \frac{C_3}{k_{sP} + C_3} \right) \quad (4.71)$$

As informações dos parâmetros utilizados nas equações 4.70 e 4.71 são encontradas na tabela 4.3.

Já para as reações baseadas nas formulações do PCLake, o fitoplâncton é indicado através da presença de carbono e seu crescimento também é limitado por nutrientes. As considerações utilizadas nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> são as mesmas adotadas para o PCLake. A formulação que determina a reação cinética da biomassa de carbono do fitoplâncton no tempo é expressa por:

$$R_{C_{10}} = \underbrace{k_g C_{10}}_{\text{crescimento}} - \underbrace{k_{ra} C_{10}}_{\text{respiração e excreção}} - \underbrace{k_{ea} C_{10}}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{\frac{V_s}{H} C_{10}}_{\text{sedimentação}} \quad (4.72)$$

onde os parâmetros são os mesmos apresentados na tabela 4.3, porém a taxa de crescimento ( $k_g$ ) não representa o fator mínimo, como demonstra a formulação do SisBaHiA<sup>®</sup>. A taxa de crescimento do PCLake é descrita como:

$$k_g = k_g \frac{C_3}{(k_{sP} + C_3)} \frac{C_1 C_2}{(k_{sN}^{NH_4} + C_1)(k_{sN}^{NO_3} + C_2)} \quad (4.73)$$

No modelo PCLake, assume-se que o fitoplâncton tanto pode consumir fósforo inorgânico, quanto nitrato, como amônia. De acordo com Fragoso Jr., Ferreira e Marques

(2009), o fitoplâncton tem uma maior preferência pela amônia, uma vez que esta forma de nitrogênio é energeticamente mais vantajosa.

Tabela 4.3 – Parâmetros utilizados nas equações do fitoplâncton.

Símbolos	Parâmetros	Unidades
$H$	Altura da coluna de água	m
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	$d^{-1}$
$k_g$	Taxa de crescimento do fitoplâncton	$d^{-1}$
$k_{ra}$	Taxa de respiração e excreção do fitoplâncton	$d^{-1}$
$k_{sN}^{NO_3}$	Constante de meia saturação do nitrato	$mg.l^{-1}$
$k_{sN}^{NH_4}$	Constante de meia saturação da amônia	$mg.l^{-1}$
$k_{sN}$	Constante de meia saturação do nitrogênio inorgânico	$mg.l^{-1}$
$k_{sP}$	Constante de meia saturação do fósforo inorgânico	$mg.l^{-1}$
$V_s$	Velocidade de sedimentação do fitoplâncton	$m.d^{-1}$

### 4.3.2 Equações do ciclo do nitrogênio

O ciclo do nitrogênio é essencial para desenvolvimento da vida aquática. Sendo assim, o nitrogênio é assimilado, sob as formas de amônia ( $C_1$ ) e nitrato ( $C_2$ ), pelo fitoplâncton para seu crescimento e produção de moléculas complexas, como proteínas e aminoácidos. Além destas, o nitrogênio possui uma forma orgânica ( $C_7$ ), proveniente da excreção, respiração e mortalidade do fitoplâncton.

#### 4.3.2.1 Nitrogênio orgânico

Segundo a formulação do SisBaHiA<sup>®</sup>, os processos que compõem as reações cinéticas válidas ao ciclo do nitrogênio orgânico são: amonificação e sedimentação, excreção, respiração e mortalidade do fitoplâncton. A amonificação é a formação de amônia durante o processo de decomposição, tanto anaeróbia como aeróbia, da parte nitrogenada da matéria orgânica dissolvida ou particulada (ROSMAN, 2016). Essa fração particulada do nitrogênio orgânico sedimenta com velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas ( $V_{s3}$ ) dividida pela profundidade ( $H$ ). A reação do nitrogênio orgânico é descrita por:

$$R_{C_7} = - \underbrace{k_{71}C_7}_{\text{amonificação}} - \underbrace{\frac{V_{s3}(1-f_7)C_7}{H}}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{r_{na}k_{ra}f_{on}C_9}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{r_{na}k_{ea}f_{on}C_9}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} \quad (4.74)$$

De acordo com Voinov e Svirezhev (1984), o detrito representa a matéria orgânica morta suspensa ou sedimentada no corpo d'água. Portanto, para o PCLake, as frações orgânicas do nitrogênio presentes na coluna d'água pertencem a concentração de detritos e o aumento da sua concentração se deve exclusivamente a mortalidade do fitoplâncton.

Além disso, a atividade de vários agentes bacterianos leva à oxidação e mineralização do nitrogênio orgânico. Sobretudo, o processo de amonificação e mineralização do nitrogênio orgânico são similares, mas são apresentados com termos distintos entre os autores. Já por parte do processo de sedimentação, o PCLake não conta com um termo relacionado a fração de nitrogênio orgânico dissolvido ( $f_7$ ) na coluna d'água.

$$R_{C_7} = - \underbrace{k_{83}C_7}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{V_{s3}C_7}{H}}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{r_{nc}k_{ea}C_9}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} \quad (4.75)$$

Os parâmetros utilizados nas formulações 4.74 e 4.75 do nitrogênio orgânico de ambos modelos são especificados na tabela 4.4.

Tabela 4.4 – Parâmetros utilizados nas equações do nitrogênio orgânico.

Símbolos	Parâmetros	Unidades
$f_7$	Fração de nitrogênio orgânico dissolvido na coluna d'água	[-]
$f_{on}$	Fração das perdas do fitoplâncton reciclada para nitrogênio orgânico	[-]
$H$	Altura da coluna d'água	m
$k_{71}$	Taxa de amonificação do nitrogênio orgânico	d <sup>-1</sup>
$k_{83}$	Taxa de mineralização	d <sup>-1</sup>
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_{ra}$	Taxa de respiração e excreção do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$r_{na}$	Razão entre nitrogênio e clorofila- <i>a</i>	mgN.μgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{nc}$	Razão entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$V_{s3}$	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas	m.d <sup>-1</sup>

#### 4.3.2.2 Amônia

A amônia é o resultado da decomposição do nitrogênio orgânico, através do processo de amonificação (mineralização). Além da amonificação ou mineralização do nitrogênio orgânico, a amônia também se torna disponível através dos processos de excreção e mortalidade do fitoplâncton.

Os processos que contribuem com a diminuição da amônia são a nitrificação e a assimilação fitoplanctônica. A nitrificação é um processo microbial aeróbio que envolve a transformação de amônia em nitrato. Como o ambiente de estudo possui temperatura homogênea e não se propõe a modelagem do oxigênio dissolvido,  $k_{12}$  é mantido como constante. Já a assimilação trata-se da dependência de amônia consumida para o crescimento algal, este termo possui formulações distintas entre os modelos. Portanto, a fração inorgânica do nitrogênio é descrita pela equação 4.76, que representa o nitrogênio amoniacal, modelado pela formulações baseadas no SisBaHiA<sup>®</sup>, e pela equação 4.78, modelada pelas formulações baseadas no PCLake.

$$\begin{aligned}
R_{C_1} = & \underbrace{r_{na}k_{ra}(1-f_{on})C_9}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{r_{na}k_{ea}(1-f_{on})C_9}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} - \underbrace{\frac{C_1}{(k_{am} + C_1)}r_{na}f_{\mu N}k_gC_9}_{\text{crescimento do fitoplâncton}} \\
& + \underbrace{k_{71}C_7}_{\text{amonificação}} - \underbrace{k_{12}C_1}_{\text{nitrificação}} \quad (4.76)
\end{aligned}$$

Considera-se que a taxa de consumo de nutrientes para o crescimento do fitoplâncton aumenta com a concentração externa, mas ao mesmo tempo diminui com a concentração interna de nutrientes do fitoplâncton, se aproximando do seu valor de saturação:

$$f_{\mu N} = \left( \frac{r_{na}^{max} - r_{na}}{r_{na}^{max} - r_{na}^{min}} \right) \left( \frac{C_1 + C_2}{k_{\mu N} + C_1 + C_2} \right) \quad (4.77)$$

onde  $k_{\mu N}$  é a constante de meia saturação para o consumo de nitrogênio.

Os nutrientes inorgânicos modelados pelo PCLake estão submetidos a difusão do sedimento, processo que pode representar o transporte do sedimento para a coluna d'água, cruzando a interface sedimento-água. Esse fluxo pode ser ascendente (definido como fluxo positivo), quanto pode ser descendente (fluxo negativo). O fluxo só acontece quando ocorre o gradiente de concentração entre o fundo e a coluna d'água. É importante salientar que o modelo proposto não simula o sedimento, apenas evidencia um processo que contribui com a dinâmica da variável de estado. As reações cinéticas da amônia são descritas pela seguinte expressão (equação 4.78):

$$\begin{aligned}
R_{C_1} = & \underbrace{-k_{dif}C_{tb}\frac{C_1^{sed} - C_1}{0,5H_tH}\epsilon}_{\text{difusão do sedimento}} - \underbrace{J\frac{C_1C_2}{(\frac{J}{C_{af1}} + C_1)(\frac{J}{C_{af2}} + C_2)}}_{\text{assimilação do fitoplâncton}}C_{10} \\
& + \underbrace{\frac{r_{nc}}{r_{nc}^{min} + r_{nc}}r_{nc}k_{ra}C_{10}}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{k_{ea}r_{nc}C_{10}}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} + \underbrace{k_{83}C_7}_{\text{mineralização}} - \underbrace{k_{12}C_1}_{\text{nitrificação}} \quad (4.78)
\end{aligned}$$

onde

$$J = k_{cons} \left( \frac{r_{nc}^{max} - r_{nc}}{r_{nc}^{max} - r_{nc}^{min}} \right) \quad (4.79)$$

Os parâmetros utilizados nas equações 4.76, 4.77, 4.78 e 4.79 são descritos na tabela 4.5.

### 4.3.2.3 Nitrito

A oxidação da amônia, realizada através da nitrificação, é um processo que produz nitratos a partir da amônia. Esse processo é realizado por bactérias nitrificantes em duas

Tabela 4.5 – Parâmetros utilizados nas equações da amônia.

Símbolos	Parâmetros	Unidades
$C_1^{sed}$	Concentração de amônia no sedimento	mg.l <sup>-1</sup>
$C_{af1}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton pela amônia	mgC.d <sup>-1</sup>
$C_{af2}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por nitrato	mgC.d <sup>-1</sup>
$C_{tb}$	Fator de bioturbação para difusão	[-]
$f_{on}$	Fração orgânica das perdas do fitoplâncton para o nitrogênio orgânico	[-]
$f_{\mu N}$	Função de limitação do consumo de nitrogênio	[-]
$H$	Altura da coluna de água	m
$H_t$	Profundidade do topo de camada de sedimento	m
$J$	Taxa de assimilação corrigida	mgN.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup> .l <sup>-1</sup>
$k_{12}$	Taxa de nitrificação	d <sup>-1</sup>
$k_{71}$	Taxa de amonificação do nitrogênio orgânico	d <sup>-1</sup>
$k_{83}$	Taxa de mineralização	d <sup>-1</sup>
$k_{am}$	Constante de meia saturação para preferência de amônia	μg.l <sup>-1</sup>
$k_{cons}$	Taxa máxima de assimilação	mgN.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup> .l <sup>-1</sup>
$k_{dif}$	Constante de difusão	m <sup>2</sup> .d <sup>-1</sup>
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_g$	Taxa de crescimento do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_{ra}$	Taxa de excreção e respiração do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_{\mu N}$	Constante de meia saturação para o consumo de nitrogênio	mg.l <sup>-1</sup>
$r_{na}$	Razão entre nitrogênio e clorofila- <i>a</i>	mgN.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{na}^{max}$	Razão máxima entre nitrogênio e clorofila- <i>a</i>	mgN.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{na}^{min}$	Razão mínima entre nitrogênio e clorofila- <i>a</i>	mgN.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{nc}$	Razão entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{nc}^{max}$	Razão máxima entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{nc}^{min}$	Razão mínima entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$\epsilon$	Porosidade corrigida	[-]

etapas. Na primeira etapa, a amônia é convertida em nitrito ( $NO_2^-$ ), na segunda etapa, com auxílio de bactérias nitrificantes, os nitritos são convertidos em nitratos ( $NO_3^-$ ).

Uma consideração tomada em ambos modelos é que durante o processo de nitrificação a oxidação da amônia para nitrato ocorre diretamente, considerando que a transformação de nitrito para nitrato é mais rápida que a transformação de amônia para nitrito. Portanto, a concentração de nitrito não é simulada.

A nitrificação é o único processo de ganho de nitrato na coluna d'água adotada pelos dois modelos em estudo. Assim como a nitrificação, outros processos que estão presentes na modelagem do nitrato tanto no SisBaHiA<sup>®</sup>, quanto no PCLake são: assimilação fitoplanctônica e a desnitrificação. Estes são processos de perda.

A desnitrificação é um importante processo onde há perdas de nitrogênio no sistema e é definida como a transformação do nitrato em substâncias voláteis, as quais podem ser cedidas ao ar atmosférico. O processo ocorre por conta de organismos microbianos e é significativo tanto na camada do topo do sedimento, como também na coluna d'água e em regiões com concentrações baixas de oxigênio. Além disso, tal processo pode ser modelado como uma taxa constante (segundo o SisBaHiA<sup>®</sup>) ou como parte da parcela aeróbia do processo de mineralização, o que torna a parcela referente a desnitrificação simplificada, quando comparada a formulação do PCLake.

Portanto a equação que define os processos de perdas e ganhos do nitrato baseado nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup>, é dada por:

$$R_{C_2} = \underbrace{k_{12}C_1}_{\text{nitrificação}} - \underbrace{k_{2D}C_2}_{\text{desnitrificação}} - \underbrace{\left(1 - \frac{C_1}{(k_{am} + C_1)}\right) r_{na} f_{\mu N} k_g C_9}_{\text{crescimento do fitoplâncton}} \quad (4.80)$$

Além dos processos recém citados, o PCLake adiciona à reação cinética do nitrato o processo de difusão do sedimento, tendo como sua formulação a equação 4.81.

$$R_{C_2} = \underbrace{k_{12}C_1}_{\text{nitrificação}} - \underbrace{k_{dif} C_{tb} \frac{C_2^{sed} - C_2}{0,5H_t H}}_{\text{difusão do sedimento}} - \underbrace{P_{er} r_{mol} C_{Per} \frac{C_2^2}{h_{den} + C_2^2} k_{83} C_2}_{\text{desnitrificação}} - \underbrace{J \frac{C_1 C_2}{\left(\frac{J}{C_{af1}} + C_1\right) \left(\frac{J}{C_{af2}} + C_2\right)}}_{\text{assimilação do fitoplâncton}} C_{10} \quad (4.81)$$

onde

$$J = k_{cons} \left( \frac{r_{nc}^{max} - r_{nc}}{r_{nc}^{max} - r_{nc}^{min}} \right) \quad (4.82)$$

Os parâmetros utilizados nas equações do nitrato, baseados nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> e do PCLake, são descritos na tabela 4.6.

### 4.3.3 Equações do ciclo do fósforo

O fósforo é um nutriente essencial para plantas e animais, e pode ser encontrado em moléculas de DNA, ATP e ADP (FRAGOSO JR.; FERREIRA; MARQUES, 2009). O fósforo é um elemento oriundo de rochas sedimentares, ossos fossilizados, fertilizantes, detergentes e esgoto. As duas formas mais comuns de medição do fósforo em águas são o fosfato reativo e o fosfato total. A variável de estado fósforo inorgânico ( $C_3$ ), utilizada nos modelos, se refere ao fósforo reativo (ortofosfato), enquanto a variável fósforo orgânico ( $C_8$ ) pode ser aproximada pela diferença entre o fosfato total e o fosfato reativo.

Tabela 4.6 – Parâmetros utilizados nas equações do nitrato.

Símbolos	Parâmetros	Unidades
$C_2^{sed}$	Concentração de nitrato no sedimento	mg.l <sup>-1</sup>
$C_{af1}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton pela amônia	mgC.d <sup>-1</sup>
$C_{af2}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por nitrato	mgC.d <sup>-1</sup>
$C_{Per}$	Conteúdo de carbono na matéria orgânica	gC.gMO <sup>-1</sup>
$c_{tb}$	Fator de bioturbação para difusão	[-]
$f_{\mu N}$	Função de limitação do consumo de nitrogênio	[-]
$H$	Altura da coluna de água	m
$h_{den}$	Constante de meia saturação quadrática para desnitrificação	mg <sup>2</sup> .l <sup>-2</sup>
$H_t$	Profundidade do topo de camada de sedimento	m
$J$	Taxa de assimilação corrigida	mgN.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup> .l <sup>-1</sup>
$k_{12}$	Taxa de nitrificação	d <sup>-1</sup>
$k_{2D}$	Taxa de desnitrificação do nitrato	d <sup>-1</sup>
$k_{83}$	Taxa de mineralização	d <sup>-1</sup>
$k_{am}$	Constante de meia saturação para preferência de amônia	μg.l <sup>-1</sup>
$k_{cons}$	Taxa máxima de assimilação	mgN.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup> .l <sup>-1</sup>
$k_{dif}$	Constante de difusão	m <sup>2</sup> .d <sup>-1</sup>
$k_g$	Taxa de crescimento do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$P_{er}$	Mols de NO <sub>3</sub> desnitrificados por mol de carbono mineralizado	[-]
$r_{na}$	Razão entre nitrogênio e clorofila- <i>a</i>	mgN.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{nc}$	Razão entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{nc}^{max}$	Razão máxima entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{nc}^{min}$	Razão mínima entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{mol}$	Razão de peso molecular entre nitrogênio e carbono	mgN.mgC <sup>-1</sup>
$\epsilon$	Porosidade corrigida	[-]

#### 4.3.3.1 Fósforo orgânico

Os processos que compõem as reações cinéticas do fósforo orgânico são: a excreção, respiração e mortalidade dos organismos aquáticos, sedimentação e mineralização. A mineralização é o mecanismo responsável em transformar o fósforo orgânico em fósforo inorgânico, através da ação de organismos decompositores.

A equação 4.83 representa a reação cinética, baseada na formulação do SisBaHiA<sup>®</sup>, relativa ao fósforo orgânico.

$$R_{C_8} = \underbrace{r_{pa}k_{ra}f_{op}C_9}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{r_{pa}k_{ea}f_{op}C_9}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} - \underbrace{k_{83}C_8}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{V_{s3}(1-f_{D8})}{H}C_8}_{\text{sedimentação}} \quad (4.83)$$

Para o PCLake, o fósforo orgânico existente na coluna d'água é resultado da fração de fósforo presente em detritos, onde esta formulação não possui ganho por excreção do fitoplâncton e não sedimenta somente a fração particulada de fósforo orgânico, como no SisBaHiA<sup>®</sup>. A equação a seguir trata-se da formulação baseada no PCLake:

$$R_{C_8} = \underbrace{r_{pc}k_{ea}C_{10}}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} - \underbrace{k_{83}C_8}_{\text{mineralização}} - \underbrace{r_{pc}\frac{V_{s3}}{H}C_{10}}_{\text{sedimentação}} \quad (4.84)$$

Os parâmetros utilizados nas equações 4.83 e 4.84 são descritos na tabela 4.7.

Tabela 4.7 – Parâmetros utilizados nas equações do fósforo orgânico.

Símbolos	Parâmetros	Unidades
$f_{D8}$	Fração de fósforo orgânico dissolvido na coluna d'água	[-]
$f_{op}$	Fração orgânica das perdas do fitoplâncton para o fósforo orgânico	[-]
$H$	Altura da coluna de água	m
$k_{83}$	Taxa de mineralização	d <sup>-1</sup>
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_{ra}$	Taxa de excreção e respiração do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$r_{pa}$	Razão entre fósforo e clorofila- <i>a</i>	mgP.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{pc}$	Razão entre fósforo e carbono	mgP.mgC <sup>-1</sup>
$V_{s3}$	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas	m.d <sup>-1</sup>

#### 4.3.3.2 Fósforo inorgânico – Ortofosfato

Os processos envolvidos na modelagem do fósforo inorgânico são: excreção, respiração, mortalidade e assimilação do fitoplâncton, mineralização, precipitação, difusão do sedimento e sedimentação.

Para o SisBaHiA<sup>®</sup>, o fósforo inorgânico aumenta com contribuição dos processos de mineralização do fósforo orgânico, excreção, respiração e mortalidade do fitoplâncton, e decai através da assimilação fitoplantônica e precipitação. A precipitação trata-se de uma deposição do fosfato reativo ao sedimento, processo similar a sedimentação. O fósforo inorgânico é a única forma de fosfato assimilada pelo fitoplâncton considerada pelo SisBaHiA<sup>®</sup>.

$$R_{C_3} = \underbrace{r_{pa}k_{ra}(1 - f_{op})C_9}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{r_{pa}k_{ea}(1 - f_{op})C_9}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} - \underbrace{r_{pa}f_{\mu P}k_g C_9}_{\text{crescimento}} + \underbrace{k_{83}C_8}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{V_{fr}}{H}C_3}_{\text{precipitação}} \quad (4.85)$$

A taxa de consumo de nutrientes para o crescimento do fitoplâncton aumenta com a concentração externa, mas ao mesmo tempo diminui com a concentração interna

de nutrientes no fitoplâncton, se aproximando do seu valor de saturação. Esse efeito é representado através da função de limitação do consumo do fósforo ( $f_{\mu P}$ ) (equação 4.86):

$$f_{\mu P} = \left( \frac{r_{pa}^{max} - r_{pa}}{r_{pa}^{max} - r_{pa}^{min}} \right) \left( \frac{C_3}{k_{\mu P} + C_3} \right) \quad (4.86)$$

De acordo com Janse (2005), a fração inorgânica do fósforo simulada pelo PCLake é compreendida em duas fases o ortofosfato ( $C_3^{PO4}$ ) e o fósforo adsorvido na matéria inorgânica ( $C_3^{Ad}$ ) na coluna d'água, porém essa segunda fração é concebida por apenas dois termos (equação 4.87):

$$R_{C_3^{Ad}} = \underbrace{k_{ad} C_3^{PO4}}_{\text{adsorção}} - \underbrace{\frac{V_s}{H} C_3^{Ad}}_{\text{sedimentação}} \quad (4.87)$$

A reação que transforma ortofosfato ( $C_3^{PO4}$ ) em fósforo adsorvido na matéria inorgânica ( $C_3^{Ad}$ ) é a adsorção e depende da concentração de oxigênio dissolvido no meio. Como essa variável de estado não é modelada neste trabalho, desprezou-se o termo associado ao processo, restando apenas a sedimentação do fósforo adsorvido na matéria inorgânica. Portanto, o ortofosfato adsorvido será de imediato sedimentado. Assim, o ortofosfato foi resumido a uma única formulação, chamado apenas de fósforo inorgânico ( $C_3$ ) contendo um termo referente a sedimentação, oriundo dos processos cinéticos do fósforo adsorvido na matéria inorgânica ( $C_3^{Ad}$ ). A equação 4.88 é referente a reação cinética do fósforo inorgânico simulada pelo PCLake.

$$\begin{aligned} R_{C_3} = & \underbrace{k_{83} C_8}_{\text{mineralização}} - \underbrace{k_{dif} \frac{C_3^{sed} - C_3}{0,5H_t H}}_{\text{difusão do sedimento}} C_{tb} \epsilon \\ & - \underbrace{k_P^c \frac{C_3}{\frac{k_P^c}{C_{af}} + C_3}}_{\text{assimilação do fitoplâncton}} C_{10} + \underbrace{\frac{r_{pc}}{r_{pc}^{min} + r_{pc}} r_{pc} k_{ra} C_{10}}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{r_{pc} k_{ea} C_{10}}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} - \underbrace{\frac{V_s}{H} C_3}_{\text{sedimentação}} \quad (4.88) \end{aligned}$$

onde

$$k_P^c = C_{up} \left( \frac{r_{pc}^{max} - r_{pc}}{r_{pc}^{max} - r_{pc}^{min}} \right) \quad (4.89)$$

e os demais parâmetros das equações 4.85, 4.86, 4.87, 4.88 e 4.89 encontram-se na tabela 4.8.

Tabela 4.8 – Parâmetros utilizados nas equações do fósforo inorgânico.

Símbolos	Parâmetros	Unidades
$C_3^{sed}$	Concentração de fósforo inorgânico no sedimento	mg.l <sup>-1</sup>
$C_{af}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por fósforo	mgC.d <sup>-1</sup>
$c_{tb}$	Fator de bioturbação para difusão	[-]
$c_{up}$	Capacidade máxima para consumo de fósforo	mgP.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup> .l <sup>-1</sup>
$f_{op}$	Fração orgânica das perdas do fitoplâncton para o fósforo orgânico	[-]
$f_{\mu P}$	Função de limitação do consumo do fósforo	[-]
$H$	Altura da coluna d'água	m
$H_t$	Profundidade do topo de camada de sedimento	m
$k_{83}$	Taxa de mineralização	d <sup>-1</sup>
$k_{ad}$	Taxa de adsorção do ortofosfato	d <sup>-1</sup>
$k_{dif}$	Constante de difusão	m <sup>2</sup> .d <sup>-1</sup>
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_g$	Taxa de crescimento do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_P^c$	Taxa de consumo de fósforo corrigida	mgP.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup> .l <sup>-1</sup>
$k_{ra}$	Taxa de respiração e excreção do fitoplâncton	d <sup>-1</sup>
$k_{\mu P}$	Constante de meia saturação para consumo de fósforo inorgânico	mg.l <sup>-1</sup>
$r_{pa}$	Razão entre fósforo e clorofila- <i>a</i>	mgP.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{pa}^{max}$	Razão máxima entre fósforo e clorofila- <i>a</i>	mgP.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{pa}^{min}$	Razão mínima entre fósforo e clorofila- <i>a</i>	mgP.mgCl- <i>a</i> <sup>-1</sup>
$r_{pc}$	Razão entre fósforo e carbono	mgP.mgC <sup>-1</sup>
$r_{pc}^{max}$	Razão máxima entre fósforo e carbono	mgP.mgC <sup>-1</sup>
$r_{pc}^{min}$	Razão mínima entre fósforo e carbono	mgP.mgC <sup>-1</sup>
$V_s$	Velocidade de sedimentação	m.d <sup>-1</sup>
$\nu_{fr}$	Velocidade de precipitação do fósforo inorgânico	m.d <sup>-1</sup>
$\epsilon$	Porosidade corrigida	[-]

#### 4.4 Validação da Relação entre os indicadores de fitoplâncton

Como os modelos propostos representam a concentração de fitoplâncton com o uso de distintos indicadores foi necessário utilizar uma relação entre clorofila-*a* e carbono, mencionada por Laws e Chalup (1990 apud CHAPRA, 1997). A relação é construída inicialmente em função da concentração de nitrogênio e da luminosidade na coluna d'água, sendo esta desprezada no modelo proposto neste trabalho.

De acordo com Chapra (1997), a maioria dos modelos de qualidade da água usa estequiometria constante para caracterizar a concentração de algas no meio. Segundo o autor, um padrão de fácil medida, como a clorofila-*a*, foi adotado como medida de biomassa de algas. Porém, as transferências entre o fitoplâncton e outras variáveis de estado nos modelos, como os nutrientes, foram então tratadas por fatores de conversão

estequiométricos simples.

Embora seja uma boa aproximação inicial, fitologistas advertem que a estequiometria celular de fato não é constante. Para Bowie et al. (1985), além dos nutrientes, uma questão mais fundamental relaciona-se ao carbono e à clorofila, uma vez que a relação entre essas variáveis de estado não é constante, e sim função dos níveis de luminosidade e do estado fisiológico das células.

Na abordagem do modelo desenvolvido por Laws e Chalup (1990), as taxas de crescimento ( $k_g$ ) e respiração celular ( $k'_{ra}$ ), juntamente com as proporções de clorofila-*a* para carbono, são simuladas como função dos níveis de luminosidade e de nutrientes. A notação do modelo que expressa a taxa de crescimento algal num meio saturado por nutrientes ( $k_s$ ) é tido por:

$$k_s = k_g^{max} \frac{I}{k_{si} + I} \quad (4.90)$$

onde  $k_g^{max}$  é taxa máxima de crescimento do fitoplâncton em meio saturado à luminosidade e à nutrientes,  $I$  é a intensidade de luz e  $k_{si}$  é a constante de meia saturação da luz.

Se esse modelo (Eq. 4.90) também admitir limitação por nutrientes, a relação das taxas de crescimento, em meio saturado, é explícita por:

$$\frac{k_g}{k_s} = \frac{n}{k_{sN} + n} \quad (4.91)$$

e a taxa de crescimento real pelo produto das equações 4.90 e 4.91.

$$k_g = k_g^{max} \frac{I}{k_{si} + I} \frac{n}{k_{sN} + n} \quad (4.92)$$

onde  $n$  é a concentração de nitrogênio total no ambiente e  $k_{sN}$  a constante de meia saturação do nutriente.

Conseqüentemente, é possível verificar que o crescimento está relacionado à luz e aos nutrientes de forma análoga a Rosman (2016) e Janse, Donk e Gulati (1995). Ou seja, corresponde ao produto de uma taxa máxima de crescimento algal e coeficientes de atenuação da luz e dos nutrientes.

No entanto, Chapra (1997) apresentou que a taxa de respiração celular por célula de carbono ( $k_{ra/c}$ ) é uma função linear do crescimento, dada por:

$$k_{ra/c} = 0,042 + 0,389k_g \quad (4.93)$$

relatando que existe uma pequena taxa de contribuição através do metabolismo basal desses organismos  $0,042 \text{ d}^{-1}$  e a taxa de respiração do fitoplâncton é em torno de 39% da taxa de crescimento efetivo do organismo. Onde  $k_{ra/c}$  é expresso em  $\text{d}^{-1}$ ,

Além disso, a relação nitrogênio/carbono é linearmente relacionada à condição de nutrientes das células, como em:

$$\frac{n}{c} = 32 + 113 \frac{k_g}{k_s} \quad (4.94)$$

onde foi mudada a expressão da proporção entre o  $\text{gN.gC}^{-1}$  para o  $\text{mgN.gC}^{-1}$ . Assim, em ambientes pobres em nutrientes ( $k_g/k_s = 0$ ), a relação nitrogênio para carbono é de  $32 \text{ mgN.gC}^{-1}$ . Para ambientes ricos em nutrientes ( $k_g/k_s = 1$ ), o valor se aproxima de  $145 \text{ mgN.gC}^{-1}$ . Assim, o modelo implica que o fitoplâncton está no limite superior quando eles estão em um ambiente rico em nutrientes e diminuem quando os nutrientes são severamente esgotados.

Da mesma maneira, a relação entre clorofila-*a* ( $C_9$ ) e carbono ( $C_{10}$ ) é tida como (LAWS; CHALUP, 1990):

$$\frac{C_9}{C_{10}} = \frac{1 - (1 - F)(1 - \frac{k_g}{k_s}) - \frac{S}{C} - \frac{k_g + k_{ra/C}}{(1 - r_g)K_e}}{W_{Chl}} \quad (4.95)$$

onde os parâmetros estão listados na tabela 4.9.

Tabela 4.9 – Parâmetros e valores utilizados nas relações entre clorofila-*a* e carbono.

Símbolos	Parâmetros	Valor padrão
$r_g$	Taxa de mudança da respiração na fotossíntese por célula	$0,28 \text{ gC.cel}^{-1}.\text{d}^{-1}$
$k_{ra/C}$	Taxa de respiração basal por célula	$0,03 \text{ d}^{-1}$
$F$	Quociente entre o índice N:C e a taxa de crescimento	$0,22$
$K_e$	Taxa fotossintetizada total	$3,6 \text{ d}^{-1}$
$W_{Chl}$	Razão Carbono/clorofila- <i>a</i>	$17 \text{ gC.gCl-}a^{-1}$
$S/C$	Carbono estrutural por célula	$0,1$

Substituindo a equação 4.91 na equação 4.95, e considerando  $k_g = k_s$ , e partindo de ambientes ricos em nutrientes, a relação entre clorofila-*a* e carbono é definida por:

$$\frac{C_9}{C_{10}} = 6.378 + 45.882 \frac{n}{(n + k_{sN})} - 22.7 \frac{n}{(n + k_{sN})} k_g \quad (4.96)$$

onde  $C_{10}$  está expresso em  $\text{mgC.l}^{-1}$  e  $C_9$  em  $\mu\text{gCl-}a.\text{l}^{-1}$ . Segundo a literatura (CHAPRA, 1997), essa relação varia entre 10 e  $100 \mu\text{gCl-}a.\text{mgC}^{-1}$ .

Para Chapra (1997), o valor mais baixo geralmente é típico de água proveniente de estados oligotróficos. Para esses sistemas é necessária menor concentração da clorofila-*a* devido à alta radiação solar. Em contraste, as águas com mais nutrientes, como em sistemas eutróficos e turvos, tendem a ter fitoplâncton com maior teor de clorofila-*a*.

Devido a restrição do nitrogênio como total influenciador da razão entre diferentes indicadores de biomassa fitoplanctônica, na equação 4.97, houve a necessidade em adicionar termos da dinâmica de crescimento do fitoplâncton utilizando outro nutriente (fósforo)

como possível controlador dessa razão. Portanto, foi desenvolvido um novo modelo para a relação clorofila-*a*/carbono, que considera a equação de crescimento populacional algal do SisBaHiA<sup>®</sup> (equação 4.71). Onde esse modelo é dado através da seguinte relação:

$$\frac{C_9}{C_{10}} = 6.378 + 45.882 \left[ \min \left( \frac{C_1 + C_2}{k_{sN} + C_1 + C_2}; \frac{C_3}{k_{sP} + C_3} \right) \right] - 22.7 \left[ \min \left( \frac{C_1 + C_2}{k_{sN} + C_1 + C_2}; \frac{C_3}{k_{sP} + C_3} \right) \right] k_g \quad (4.97)$$

## 5 Análise dos Parâmetros Biológicos – Modelo Concentrado

Uma avaliação das formulações do crescimento fitoplanctônico em função do ciclo do nitrogênio e do fósforo foi realizada, a fim de verificar se há similaridade no crescimento algal limitado pela presença de nutrientes (amônia, nitrato e fósforo inorgânico – ortofosfato), uma vez indicada pela presença de clorofila-*a* (equação 4.70), noutra indicada pela presença de carbono (equação 4.72).

Este capítulo apresenta a análise dos modelos concentrados antes da implementação das equações num sistema bidimensional. Foram simulados 52 lagos, para as duas formulações (SisBaHiA<sup>®</sup> e PCLake). É mostrado neste capítulo o resultado do lago Beulakerwijde e Zuidlaardermeer, como exemplos dos casos obtidos.

### 5.1 Aplicação dos modelos concentrados

Foram implementados dois modelos concentrados sem considerar os termos advectivos e difusivos, usando como base as formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> e do PCLake, capazes de simular o crescimento do fitoplâncton, usando o carbono (PCLake) ou clorofila-*a* (SisBaHiA<sup>®</sup>) como indicador, em função da carga de fósforo e nitrogênio.

Para isso, foi necessário adaptar as formulações das reações cinéticas para as concentrações de nitrogênio orgânico ( $C_7$ ), amônia ( $C_1$ ), nitrato ( $C_2$ ) fósforo orgânico ( $C_8$ ), fósforo inorgânico ( $C_3$ ) e fitoplâncton ( $C_9$  e  $C_{10}$ ), para um cenário com perdas constantes (excreção, respiração e mortalidade do fitoplâncton), desprezando variações espaciais da biomassa desse organismo, além de considerar que o crescimento do fitoplâncton ( $k_g$ ) depende dos níveis de amônia, nitrato ou de fósforo inorgânico (ou ortofosfato), sendo esses nutrientes limitantes.

As equações abaixo correspondem ao modelo concentrado baseado nas formulações do ciclo do nitrogênio ( $C_7$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) e do ciclo do fósforo ( $C_8$  e  $C_3$ ) e crescimento do fitoplâncton ( $C_9$ ), respectivamente, no SisBaHiA<sup>®</sup>:

$$\begin{aligned} \forall \frac{dC_7}{dt} = & - \underbrace{k_{71}C_7\forall}_{\text{amonificação}} - \underbrace{\frac{V_{s3}(1-f_7)C_7\forall}{H}}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{r_{na}k_{ra}f_{on}C_9\forall}_{\text{excreção do fitoplâncton}} \\ & + \underbrace{r_{na}k_{ea}f_{on}C_9\forall}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} + \underbrace{W_7 - QC_7}_{\text{balanço mássico}} \quad (5.1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \forall \frac{dC_1}{dt} = & \underbrace{r_{na}k_{ra}(1-f_{on})C_9\forall}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{r_{na}k_{ea}(1-f_{on})C_9\forall}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} - \underbrace{\frac{C_1}{(k_{am} + C_1)}r_{na}f_{\mu N}k_gC_9\forall}_{\text{crescimento do fitoplâncton}} \\ & + \underbrace{k_{71}C_7\forall}_{\text{amonificação}} - \underbrace{k_{12}C_1\forall}_{\text{nitrificação}} + \underbrace{W_1 - QC_1}_{\text{balanço mássico}} \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\forall \frac{dC_2}{dt} = \underbrace{k_{12}C_1\forall}_{\text{nitrificação}} - \underbrace{k_{2D}C_2\forall}_{\text{desnitrificação}} - \underbrace{\left(1 - \frac{C_1}{(k_{am} + C_1)}\right)r_{na}f_{\mu N}k_gC_9\forall}_{\text{crescimento do fitoplâncton}} + \underbrace{W_2 - QC_2}_{\text{balanço mássico}} \quad (5.3)$$

$$\forall \frac{dC_8}{dt} = \underbrace{r_{pa}k_{ra}f_{op}C_9\forall}_{\text{respiração e excreção}} + \underbrace{r_{pa}k_{ea}f_{op}C_9\forall}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{k_{83}C_8\forall}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{V_{s3}(1-f_{D8})}{H}C_8\forall}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{W_8 - QC_8}_{\text{balanço mássico}} \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} \forall \frac{dC_3}{dt} = & \underbrace{r_{pa}k_{ra}(1-f_{op})C_9\forall}_{\text{respiração e excreção}} + \underbrace{r_{pa}k_{ea}(1-f_{op})C_9\forall}_{\text{mortalidade}} \\ & - \underbrace{r_{pa}f_{\mu P}k_gC_9\forall}_{\text{crescimento}} + \underbrace{k_{83}C_8\forall}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{v_{fr}}{H}C_3\forall}_{\text{precipitação}} + \underbrace{W_3 - QC_3}_{\text{balanço mássico}} \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\forall \frac{dC_9}{dt} = \underbrace{k_gC_9\forall}_{\text{assimilação de nutrientes}} - \underbrace{k_{ra}C_9\forall}_{\text{respiração e excreção}} - \underbrace{k_{ea}C_9\forall}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{\frac{V_s}{H}C_9\forall}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{W_9 - QC_9}_{\text{balanço mássico}} \quad (5.6)$$

onde  $W_1, W_2, W_3, W_7, W_8,$  e  $W_9$  representam as vazões mássicas das variáveis de estado.

Por outro lado, as equações a seguir correspondem ao modelo concentrado baseado nas formulações das mesmas variáveis de estado presentes no PCLake, atentando que a equação referente ao crescimento do fitoplâncton ( $C_{10}$ ) possui o carbono como indicador:

$$\forall \frac{dC_7}{dt} = - \underbrace{k_{83}C_7\forall}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{V_{s3}C_7\forall}{H}}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{r_{nc}k_{ea}C_9\forall}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} + \underbrace{W_7 - QC_7}_{\text{balanço mássico}} \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} \forall \frac{dC_1}{dt} = & - \underbrace{\forall k_{dif}C_{tb} \frac{C_1^{sed} - C_1}{0,5H_tH}}_{\text{difusão do sedimento}} - \underbrace{\frac{J}{H} \frac{C_1C_2}{(\frac{J}{C_{af1}} + C_1)(\frac{J}{C_{af2}} + C_2)}}_{\text{assimilação do fitoplâncton}} C_{10}\forall \\ & + \underbrace{\frac{r_{nc}}{r_{nc}^{min} + r_{nc}} r_{nc}k_{ra}C_{10}\forall}_{\text{excreção do fitoplâncton}} + \underbrace{k_{ea}r_{nc}C_{10}\forall}_{\text{mortalidade do fitoplâncton}} + \underbrace{k_{83}C_7\forall}_{\text{mineralização}} - \underbrace{k_{12}C_1\forall}_{\text{nitrificação}} + \underbrace{W_1 - QC_1}_{\text{balanço mássico}} \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} \forall \frac{dC_2}{dt} = & \underbrace{k_{12}C_1\forall}_{\text{nitrificação}} - \underbrace{\forall k_{dif}C_{tb} \frac{C_2^{sed} - C_2}{0,5H_tH}}_{\text{difusão do sedimento}} \epsilon - \underbrace{P_{er}r_{mol}C_{Per} \frac{C_2^2}{h_{den} + C_2} k_{83}C_2\forall}_{\text{desnitrificação}} \\ & - \underbrace{\frac{J}{H} \frac{C_1C_2}{(\frac{J}{C_{af1}} + C_1)(\frac{J}{C_{af2}} + C_2)}}_{\text{assimilação do fitoplâncton}} C_{10}\forall + \underbrace{W_2 - QC_2}_{\text{balanço mássico}} \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\forall \frac{dC_8}{dt} = \underbrace{r_{pc}k_{ea}C_{10}\forall}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{k_{83}C_8\forall}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{V_{s3}}{H}C_{10}\forall}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{W_8 - QC_8}_{\text{balanço mássico}} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \forall \frac{dC_3}{dt} = & \underbrace{k_{83}C_8\forall}_{\text{mineralização}} + \underbrace{\forall k_{dif} \frac{C_3^{sed} - C_3}{2H_tH} C_{tb}\epsilon}_{\text{difusão do sedimento}} - \underbrace{k_P^c \frac{C_3}{\frac{k_P^c}{C_{af}} + C_3} C_{10}\forall}_{\text{assimilação de nutrientes}} \\ & + \underbrace{\frac{r_{pc}}{r_{pc}^{min} + r_{pc}} r_{pc}k_{ra}C_{10}\forall}_{\text{respiração e excreção}} + \underbrace{r_{pc}k_{ea}C_{10}\forall}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{\frac{V_s}{H}C_3\forall}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{W_3 - QC_3}_{\text{balanço mássico}} \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\forall \frac{dC_{10}}{dt} = \underbrace{k_gC_{10}\forall}_{\text{crescimento}} - \underbrace{k_{ra}C_{10}\forall}_{\text{respiração e excreção}} - \underbrace{k_{ea}C_{10}\forall}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{\frac{V_s}{H}C_{10}\forall}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{W_{10} - QC_{10}}_{\text{balanço mássico}} \quad (5.12)$$

onde  $W_1, W_2, W_3, W_7, W_8,$  e  $W_{10}$  representam as vazões mássicas das variáveis de estado.

Para que a solução analítica do modelo (modelo concentrado) tivesse um resultado definido foi necessário resolver as equações de 5.7 a 5.12 numa ordem predeterminada, levando em conta as variáveis dependentes da função, como ilustrado no esquema a seguir:

- 1º Passo:

$$\frac{dC_{phyt}}{dt} = f(C_{phyt})$$

- 2º Passo:

$$\frac{dC_7}{dt} = f(C_{phyt}, C_7)$$

$$\frac{dC_8}{dt} = f(C_{phyt}, C_8)$$

- 3º Passo:

$$\frac{dC_1}{dt} = f(C_{phyt}, C_7, C_1)$$

$$\frac{dC_3}{dt} = f(C_{phyt}, C_8, C_3)$$

- 4º Passo:

$$\frac{dC_2}{dt} = f(C_{phyt}, C_7, C_1, C_2)$$

onde  $C_{phyt}$  corresponde a variável de estado que quantifica a concentração do fitoplâncton, sendo  $C_9$  para as formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> e  $C_{10}$  para as formulações do PCLake.

## 5.2 Validação do Modelo

Janse (2005) aplicou o PCLake em 52 lagos, localizados em regiões temperadas (Holanda, Bélgica, Polônia, Irlanda, Dinamarca e Espanha). Essa aplicação considerou diferentes parâmetros como: profundidade média, área superficial do lago, vazão, carga de nutrientes e carga do fitoplâncton (através do seu respectivo indicador). O conjunto de dados engloba uma grande variedade de lagos com cargas de entrada de nitrogênio entre 0,03 e 43,70 mgN.l<sup>-1</sup>, cargas de fósforo variando entre 0,002 e 2,040 mgP.l<sup>-1</sup>, profundidades médias de 0,8 a 6,8 metros, áreas de espelho d'água entre 1 e 4570 hectares e vazão volumétrica entre 0,34 e 24278,00 l.s<sup>-1</sup>. Os resultados dos demais lagos estão em anexo.

### 5.2.1 Simulação do lago Beulakerwijde

Para simular as reações cinéticas no interior do lago Beulakerwijde foram utilizados dois modelos, um que indica o crescimento algal através da clorofila-*a* e um segundo modelo que estabelece esse crescimento através do carbono. Ambos foram simulados durante 30 dias, com passo de tempo de 60 segundos. As concentrações iniciais foram consideradas nulas para todas as substâncias ( $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_7$ ,  $C_8$ ,  $C_9$  e  $C_{10}$ ). Além disso, os dados apresentados por Janse (2005) são relacionados apenas às cargas de clorofila-*a*. Para a definição das cargas de carbono foi usado o limite inferior da relação de Chapra (1997) (ver equação 4.97). Portanto, foi utilizado como dado de entrada a clorofila-*a* com uma concentração de 99  $\mu\text{gCl-}a.l^{-1}$ . Como o modelo que utiliza a formulação do PCLake possui indicador de fitoplâncton referente a presença de carbono foi utilizado o limite inferior da faixa (10  $\mu\text{gCl-}a.mgC^{-1}$ ). Sendo assim, a carga de entrada utilizada no modelo que utiliza as formulações do PCLake foi de 9,9 mgC.l<sup>-1</sup>.

Como os dados de carga de nutrientes apresentado por Janse (2005) são referentes ao nitrogênio total; foi adotada uma redistribuição baseada em Sperling (1995). O nitrogênio total foi redistribuído como uma fração de 50% de nitrogênio orgânico, 35% para amônia e 15% para nitrato. Já para o fósforo total, a redistribuição foi feita por uma fração de 50% para fósforo orgânico e 50% para fósforo inorgânico. Os demais dados de entrada e parâmetros utilizados no modelo são apresentados na tabela 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4.

Tabela 5.1 – Características hidráulicas do lago Beulakerwijde.

Volume (m <sup>3</sup> )	Área (m <sup>2</sup> )	Vazão (m <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> )
23400000	13000000	1,5046

Tabela 5.2 – Vazões mássicas de entrada no lago Beulakerwijde.

$W_7$ (mg.s <sup>-1</sup> )	$W_1$ (mg.s <sup>-1</sup> )	$W_2$ (mg.s <sup>-1</sup> )	$W_8$ (mg.s <sup>-1</sup> )	$W_3$ (mg.s <sup>-1</sup> )	$W_9$ (μg/s <sup>-1</sup> )	$W_{10}$ (mg.s <sup>-1</sup> )
2,55	1,785	0,765	0,255	0,255	99	9,9

Tabela 5.3 – Valores dos parâmetros utilizados no modelo baseado nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup>.

Símbolos	Descrição do parâmetro	SisBaHiA <sup>®</sup>
$f_7$	Fração de nitrogênio orgânico dissolvido na coluna d'água	0,1
$f_{D8}$	Fração de fósforo orgânico dissolvido na coluna d'água	0,9
$f_{on}$	Fração das perdas do fitoplâncton reciclada para nitrogênio orgânico	0,5
$f_{op}$	Fração orgânica das perdas do fitoplâncton para o fósforo orgânico	0,5
$k_{12}$	Taxa de nitrificação	0,25 d <sup>-1</sup>
$k_{71}$	Taxa de amonificação do nitrogênio	0,03 d <sup>-1</sup>
$k_{83}$	Taxa de mineralização	0,03 d <sup>-1</sup>
$k_{2D}$	Taxa de desnitrificação do nitrato	0,1 d <sup>-1</sup>
$k_{am}$	Constante de meia saturação para preferência de amônia	50 μgN.l <sup>-1</sup>
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	0,1 d <sup>-1</sup>
$k_g$	Taxa de crescimento do fitoplâncton	1,0 d <sup>-1</sup>
$k_{ra}$	Taxa de respiração e excreção do fitoplâncton	0,2 d <sup>-1</sup>
$k_{sN}$	Constante de meia saturação do nitrogênio inorgânico	0,2 mgN.l <sup>-1</sup>
$k_{sP}$	Constante de meia saturação do fósforo inorgânico	0,08 mgP.l <sup>-1</sup>
$k_{\mu N}$	Constante de meia saturação para consumo de nitrogênio	0,0014 mg.l <sup>-1</sup>
$k_{\mu P}$	Constante de meia saturação para consumo de fósforo	0,0028 mg.l <sup>-1</sup>
$r_{na}$	Razão entre nitrogênio e clorofila-a	7 mgN.mgCl-a <sup>-1</sup>
$r_{na}^{max}$	Razão máxima entre nitrogênio e clorofila-a	12,0 mgN.mgCl-a <sup>-1</sup>

Tabela 5.3 – Continuação

Símbolos	Descrição do parâmetro	SisBaHiA <sup>®</sup>
$r_{na}^{min}$	Razão mínima entre nitrogênio e clorofila-a	2,0 mgN.mgCl-a <sup>-1</sup>
$r_{pa}$	Razão entre fósforo e clorofila-a	2,0 mgP.mgCl-a <sup>-1</sup>
$r_{pa}^{max}$	Razão máxima entre fósforo e clorofila-a	5,0 mgP.mgCl-a <sup>-1</sup>
$r_{pa}^{min}$	Razão mínima entre fósforo e clorofila-a	0,5 mgP.mgCl-a <sup>-1</sup>
$V_s$	Velocidade de sedimentação	0,25 m.d <sup>-1</sup>
$V_{s3}$	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas	0,25 m.d <sup>-1</sup>
$\nu_{fr}$	Velocidade de precipitação do fósforo inorgânico	0,25 m.d <sup>-1</sup>

Tabela 5.4 – Valores dos parâmetros utilizados no modelo baseado nas formulações do PCLake.

Símbolos	Descrição do parâmetro	PCLake
$C_1^{sed}$	Concentração de amônia no sedimento	0,020 mg.l <sup>-1</sup>
$C_2^{sed}$	Concentração de nitrato no sedimento	0,005 mg.l <sup>-1</sup>
$C_3^{sed}$	Concentração de ortofosfato no sedimento	0,050 mg.l <sup>-1</sup>
$C_{af}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por fósforo	0,00002 mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup>
$C_{af1}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por amônia	0,00020 mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup>
$C_{af2}$	Fator de afinidade de consumo do fitoplâncton por nitrato	0,00007 mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup>
$C_{Per}$	Conteúdo de carbono na matéria orgânica	0,4 gC.gMO <sup>-1</sup>
$c_{tb}$	Fator de bioturbação	50
$c_{up}$	Capacidade máxima para consumo de fósforo	0,5 mgP.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup>
$h_{den}$	Constante de meia saturação quadrática para desnitrificação	0,00002 mg <sup>2</sup> .l <sup>-2</sup>
$H_t$	Profundidade do topo da camada de sedimento	0,05 m
$k_{12}$	Taxa de nitrificação	0,25 d <sup>-1</sup>
$k_{83}$	Taxa de mineralização	0,03 d <sup>-1</sup>
$k_{cons}$	Capacidade máxima para consumo de nitrogênio	0,7 mgN.mgC <sup>-1</sup> .d <sup>-1</sup>

Tabela 5.4 – Continuação

Símbolos	Descrição do parâmetro	PCLake
$k_{dif}^{NH_4}$	Constante de difusão da amônia	0,000112 m <sup>2</sup> .d <sup>-1</sup>
$k_{dif}^{NO_3}$	Constante de difusão do nitrato	0,000860 m <sup>2</sup> .d <sup>-1</sup>
$k_{dif}^P$	Constante de difusão do ortofosfato	0,000072 m <sup>2</sup> .d <sup>-1</sup>
$k_{ea}$	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	0,1 d <sup>-1</sup>
$k_g$	Taxa de crescimento do fitoplâncton	1,0 d <sup>-1</sup>
$k_{ra}$	Taxa de respiração e excreção do fitoplâncton	0,2 d <sup>-1</sup>
$k_{sN}^{NH_4}$	Constante de meia saturação da amônia	0,11 mg.l <sup>-1</sup>
$k_{sN}^{NO_3}$	Constante de meia saturação do nitrato	0,09 mg.l <sup>-1</sup>
$k_{sP}$	Constante de meia saturação do ortofosfato	0,08 mg.l <sup>-1</sup>
$P_{er}$	Mols de $NO_3$ desnitrificados por mol de carbono mineralizado	0,8
$r_{pc}^{max}$	Razão máxima entre fósforo e carbono	0,015 mgP.mgC <sup>-1</sup>
$r_{pc}$	Razão entre fósforo e carbono	0,004 mgP.mgC <sup>-1</sup>
$r_{pc}^{min}$	Razão mínima entre fósforo e carbono	0,002 mgP/mgC
$r_{nc}^{max}$	Razão máxima entre nitrogênio e carbono	0,10 mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{nc}$	Razão entre nitrogênio e carbono	0,06 mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{nc}^{min}$	Razão mínima entre nitrogênio e carbono	0,02 mgN.mgC <sup>-1</sup>
$r_{mol}$	Razão de peso molecular entre nitrogênio e carbono	1,1667 gN.gC <sup>-1</sup>
$V_s$	Velocidade de sedimentação	0,25 m.d <sup>-1</sup>
$V_{s3}$	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas	0,25 m.d <sup>-1</sup>
$\epsilon$	Porosidade	0,7372

A estabilização do sistema foi obtida aproximadamente 6 horas após o início da simulação, para todas as variáveis de estado, tanto no modelo baseado nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> quanto no modelo baseado nas formulações do PCLake.

Para se ter uma melhor visualização do comportamento dessas variáveis, ao longo do tempo, são mostrados apenas os cinco primeiros dias, para o caso do lago Beulakerwijde. A medida foi adotada, uma vez que o regime permanente ocorra ainda no primeiro dia, sob essas condições. A variação temporal das variáveis de estado no sistema é

ilustrada nas figuras 5.1, 5.2 e 5.3. A figura 5.1 representa a simulação das variáveis de estado presentes no ciclo do nitrogênio, a figura 5.2 às variáveis pertencentes ao ciclo do fósforo e a figura 5.3 a variação temporal do fitoplâncton com diferentes indicadores da sua biomassa.

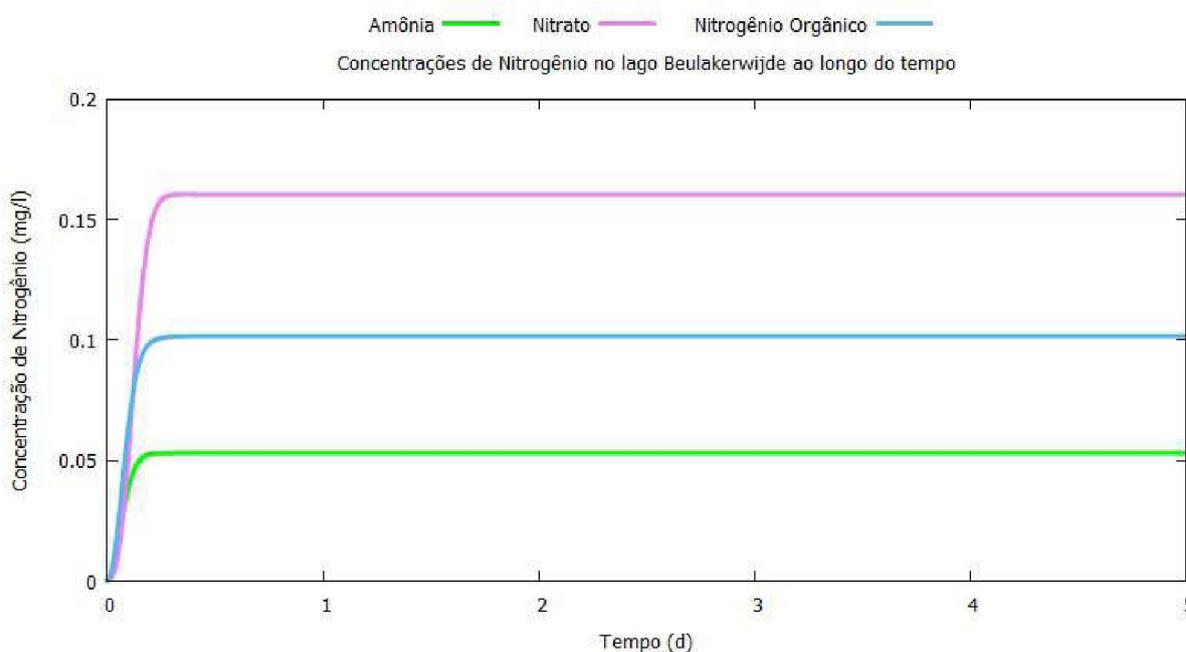


Figura 5.1 – Estabilização das variáveis de estado referentes ao Nitrogênio ao longo do tempo – lago Beulakerwijde.

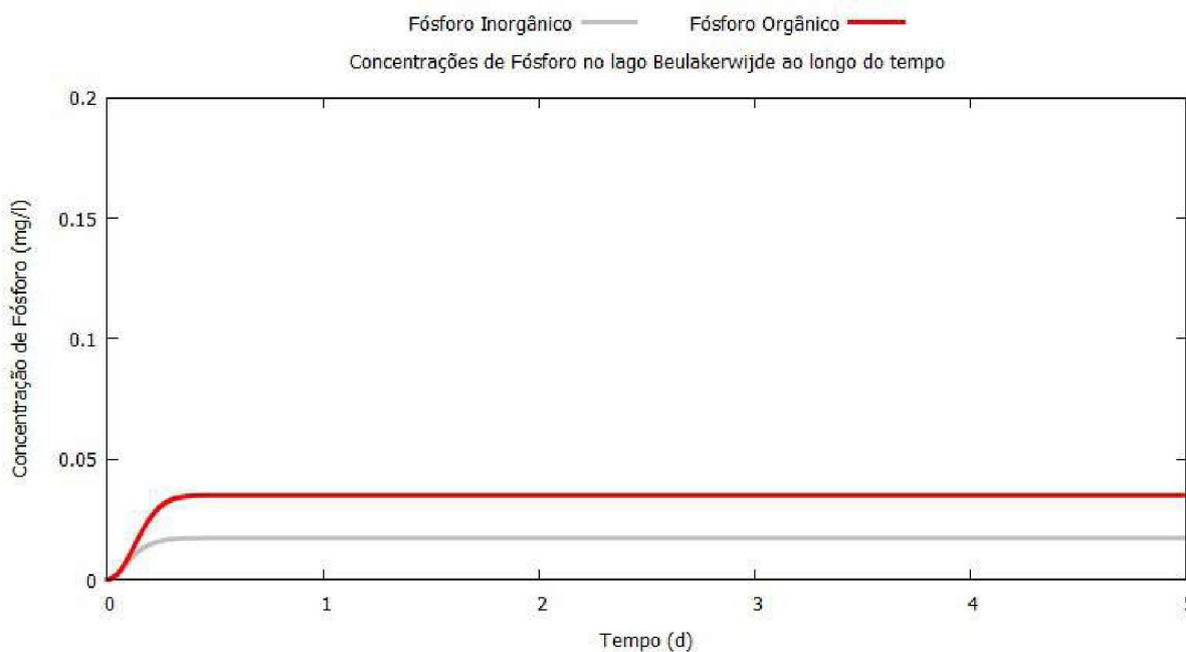


Figura 5.2 – Estabilização das variáveis de estado referentes ao Fósforo ao longo do tempo – lago Beulakerwijde.

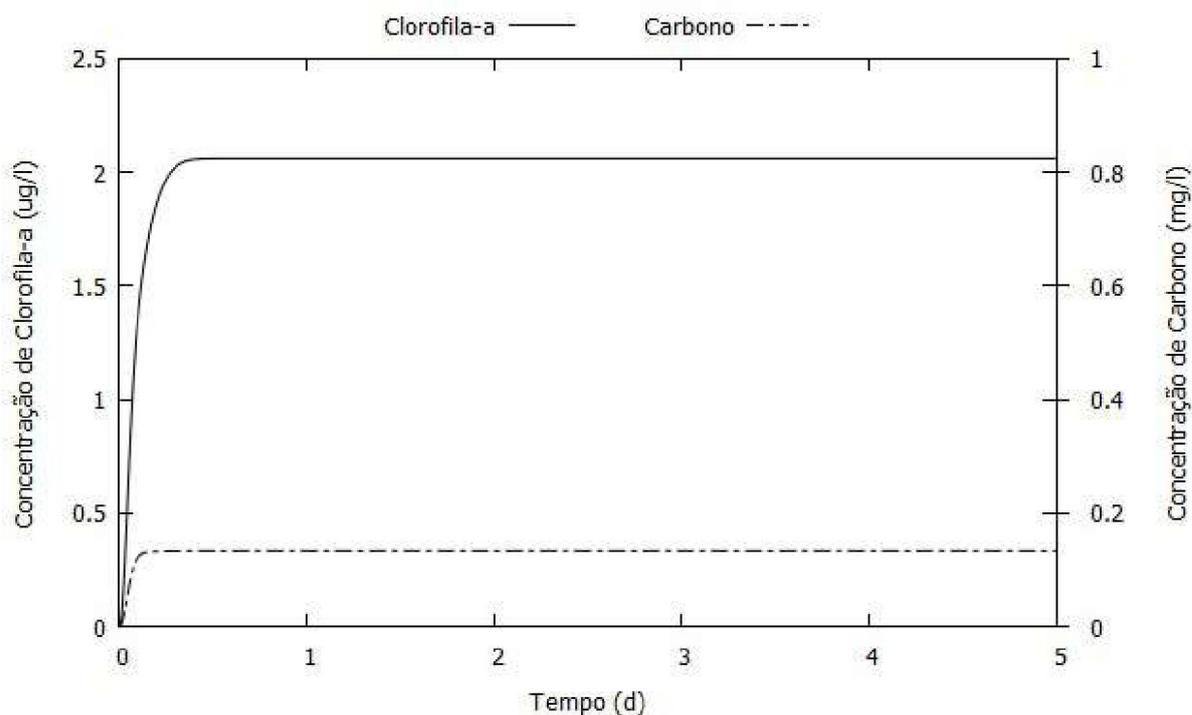


Figura 5.3 – Variação temporal das concentrações do fitoplâncton (indicado pela clorofila-a e carbono) no lago Beulakerwijde.

É possível observar que, para as simulações de cada variável de estado, no interior do lago, o comportamento é semelhante. Há um crescimento característico, seguido de uma suave estabilização e manutenção da concentração do poluente. Esse comportamento foi caracterizado para todos os outros lagos, independente das cargas de entrada, das características hidráulicas, da área do espelho d'água e do volume do corpo hídrico.

Esse procedimento foi feito para os lagos que possuem as mais distintas características hidráulicas, apresentadas na tabela A.1 do Anexo, e cargas de entrada apresentadas na tabela A.1 do Apêndice, além de utilizar os mesmos parâmetros apresentados nas tabelas 5.3 e 5.4. Após a simulação dos modelos concentrados, para todos os lagos, foi possível observar que as variáveis de estado calculadas possuem o mesmo padrão de crescimento apresentados através das figuras 5.1, 5.2 e 5.3.

### 5.3 Crescimento Fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer

Um dos parâmetros que intensifica ou minimiza as concentrações de fitoplâncton no meio é a razão entre nutrientes e o respectivo indicador da biomassa ( $r_{na}$ ,  $r_{pa}$ ,  $r_{nc}$  e  $r_{pc}$ ). A complexidade da obtenção desse termo envolve fatores como espécie do fitoplâncton e fase da vida da espécie, fazendo com que essa relação, geralmente, modifique em função do tempo. Devido a isso, foi avaliado o comportamento dessas razões a fim de verificar a influência destas reações no crescimento do fitoplâncton.

As razões utilizadas no modelo foram adotadas previamente como a média entre os limites inferiores e superiores, de acordo com a literatura específica (Rosman (2016) e Janse (2005)). Porém, para verificar a concentração de fitoplâncton em função da razão nutriente/biomassa, foram modificadas as razões ( $r_{na}$ ,  $r_{pa}$ ,  $r_{nc}$  e  $r_{pc}$ ) e adotadas oito novas razões entre os valores limites das razões mínimas e máximas utilizadas nos parâmetros. Para cada nova razão, o modelo concentrado foi executado, porém as outras razões mantiveram-se como padrão, e o modelo quantificava o crescimento fitoplanctônico até a estagnação do sistema. Após a estagnação do sistema, o valor da concentração era registrado e o modelo era executado novamente com uma nova razão. Após a oitava simulação, a taxa de crescimento foi modificada e repetida a ação. Os perfis de florescimento de algas apresentados nas figuras 5.4, 5.5 e 5.6 são referentes ao lago Zuidlaardermeer.

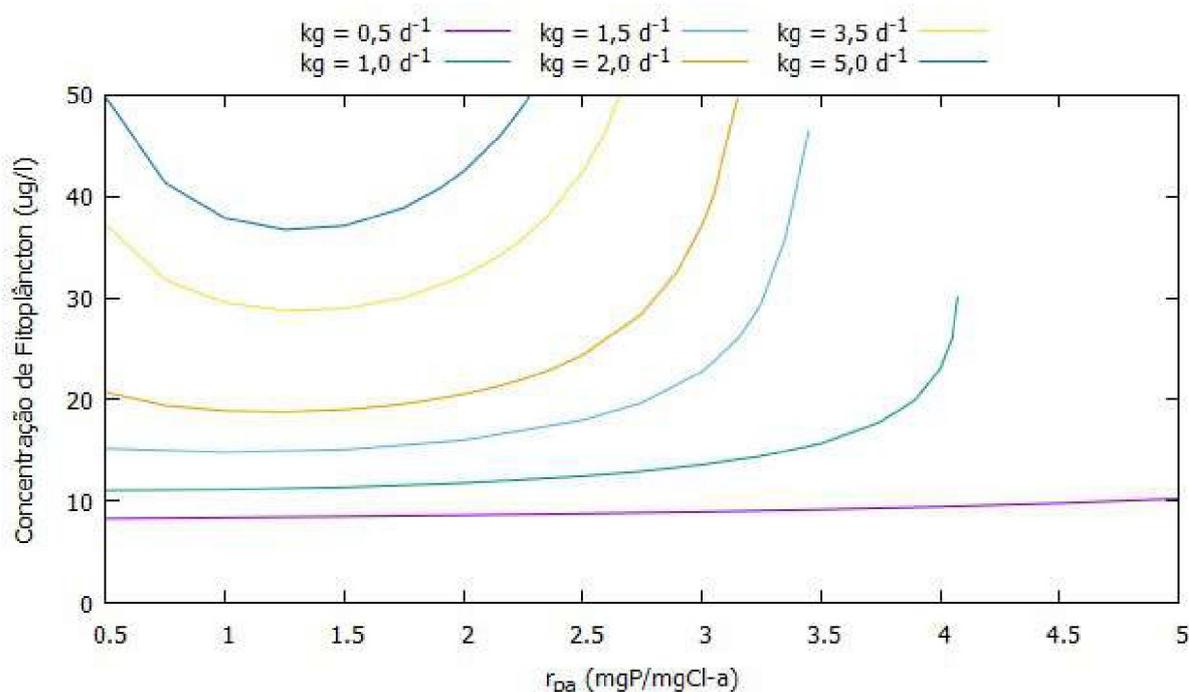


Figura 5.4 – Crescimento do fitoplâncton em função da razão entre o fósforo e a clorofila-*a* para diferentes taxas de crescimento fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer. Formulação baseada no SisBaHiA<sup>®</sup>.

É importante salientar que há diferença na formulação do crescimento fitoplanctônico ( $k_g$ ) entre os modelos, como apresentado nas equações 4.71 e 4.73. E como consequência dessa distinção, o aumento da biomassa se dá de forma diferente como mostrado nas figuras 5.4 e 5.5. A equação 4.71, formulação utilizada pelo SisBaHiA<sup>®</sup>, utiliza da função mínima para crescimento. Devido a característica da função mínima, o fósforo, por geralmente possuir concentrações numericamente menores que o nitrogênio, interfere de forma mais evidente no aumento do organismo. Já o crescimento fitoplanctônico baseado na formulação do PCLake (apresentado através da equação 4.73) se dá de forma suave e linear,

uma vez que a razão entre nitrogênio e carbono ( $r_{nc}$ ) também interfere no crescimento do organismo (figura 5.6).

Ainda assim, através da formulação do PCLake, o fósforo é o principal contribuinte para o crescimento algal, dado que as variações obtidas na figura 5.5 são superiores as variações da figura 5.6. Essa conclusão foi retirada a partir da inclinação das retas obtidas nos gráficos citados.

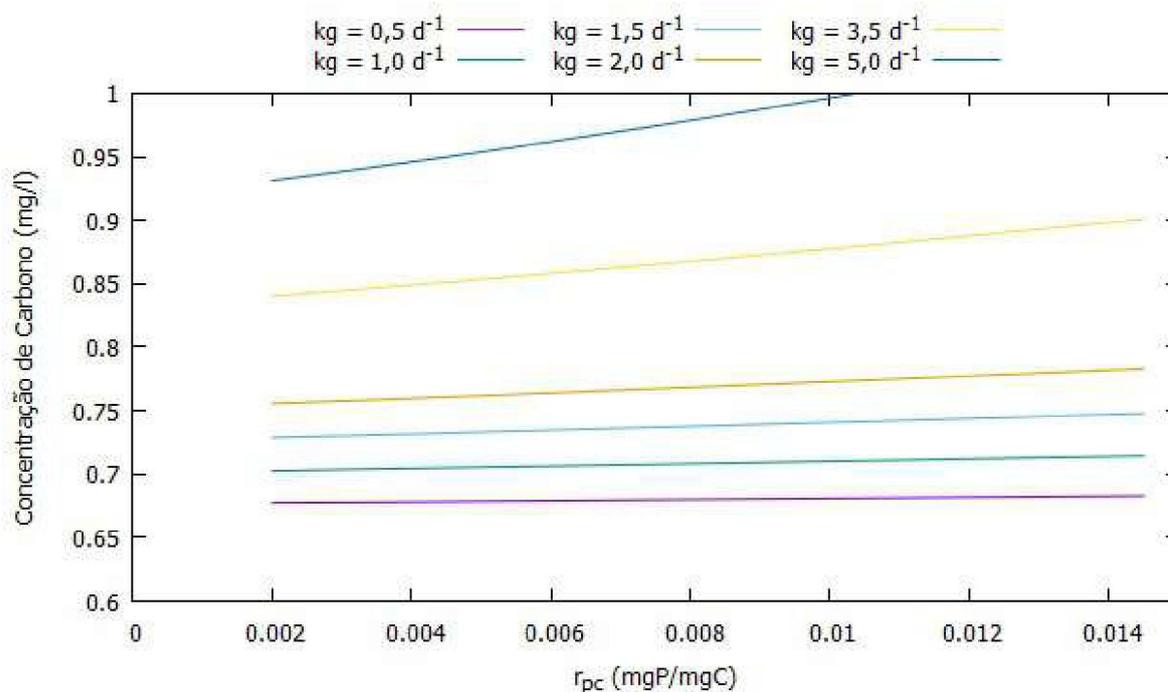


Figura 5.5 – Crescimento do fitoplâncton em função da razão entre o fósforo e carbono para diferentes taxas de crescimento fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer. Formulação baseada no PCLake.

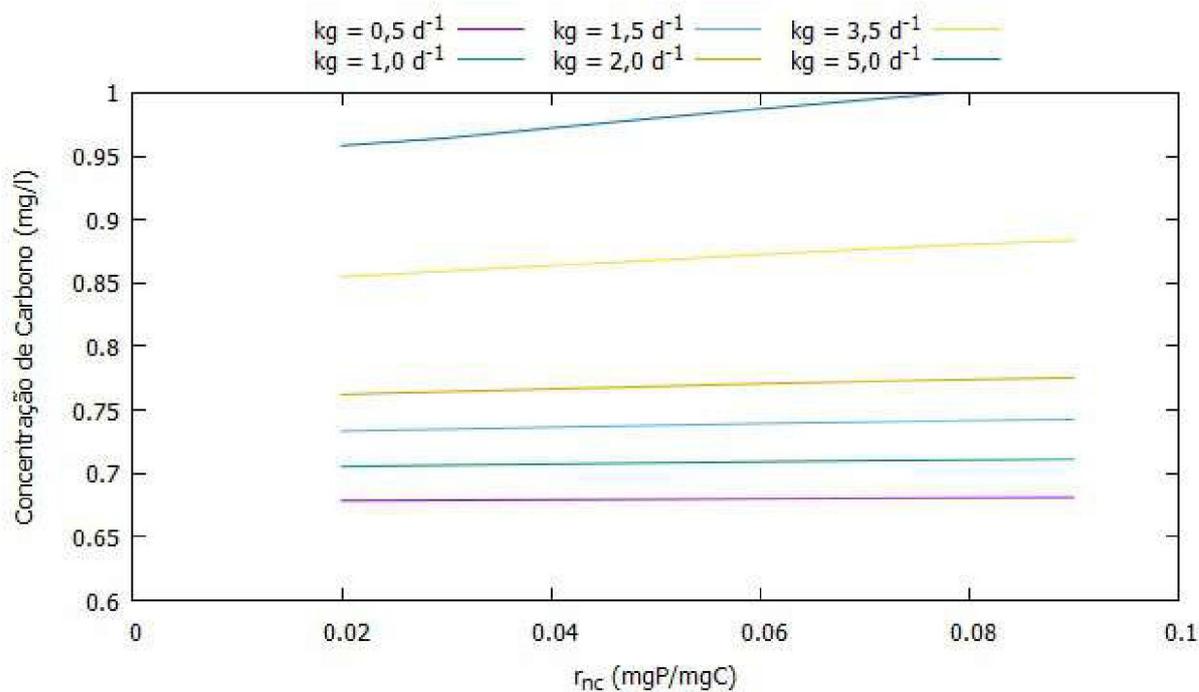


Figura 5.6 – Crescimento do fitoplâncton em função da razão entre o nitrogênio e carbono para diferentes taxas de crescimento fitoplanctônico – lago Zuidlaardermeer. Formulação baseada no PCLake.

## 5.4 Relação entre Indicadores do Fitoplâncton

Após definir os parâmetros das reações cinéticas a serem utilizados para todos os lagos, foram verificados dois tipos de relação entre os indicadores de fitoplâncton. A primeira relação é dada entre a quantificação da clorofila-*a*, utilizando as formulações do SisBaHiA<sup>®</sup>, dividida pela respectiva quantificação do carbono, utilizando as formulações do PCLake, essa relação é dada após estabilização temporal do sistema. Já a segunda relação é dada exclusivamente pela formulação de Chapra (1997), em função da quantidade de nutrientes presentes no meio e da taxa de crescimento do fitoplâncton.

O modelo foi executado com três distintos grupos de fitoplâncton, com diferentes  $r_{pa}$ ,  $r_{nc}$  e  $r_{pc}$ . A execução do modelo concentrado para esse caso, teve como intuito verificar se os valores calculados e estimados da relação clorofila-*a*/carbono compactuam com a relação proposta no trabalho, conforme equação 4.97. Diferente dos parâmetros apresentados na seção anterior, os grupos de fitoplâncton foram subdivididos em três, apresentando diferentes razões na composição da sua biomassa. Dessa vez, o intuito de simular distintos grupos de fitoplâncton foi de verificar a relação da biomassa do fitoplâncton obtidas através do cálculo entre as equações 4.71 e 4.73), e comparar com a formulação proposta pela equação 4.97. Não houve necessidade de modificar  $r_{na}$ , uma vez que essa razão só é utilizada nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> e todos os lagos possuem

limitação de crescimento à presença de fósforo. Os valores das razões para os grupos de fitoplâncton instituídos estão dispostos na tabela 5.5.

Tabela 5.5 – Valores das razões  $r_{na}$ ,  $r_{pa}$ ,  $r_{nc}$  e  $r_{pc}$  para diferentes grupos de fitoplâncton discriminado por composição da sua biomassa.

Grupo	$r_{na}$	$r_{pa}$	$r_{nc}$	$r_{pc}$
1	7,0	1,0	0,06	0,004
2	7,0	4,0	0,07	0,010
3	7,0	2,0	0,06	0,008

A escolha dos lagos foi aleatório, de modo que os fitoplânctons que possuem uma estrutura equivalente ao grupo 1 foram utilizados nos lagos enumerados de 1 a 16 (a enumeração segue a ordem apresentada na tabela A.1 do anexo), os fitoplânctons pertencentes ao grupo 2 foram utilizados nas simulações dos lagos enumerados de 17 a 34. Já o terceiro grupo foi utilizado na simulação dos demais lagos restantes, obedecendo o seguimento. O resultado de todas as simulações se encontra nas tabelas B.1 e B.2 no Apêndice.

Os resultados obtidos para as simulações, que correspondem aos lagos mostrados nas tabelas B.1 e B.2 no Apêndice, estão apresentados na figura 5.7. No eixo das abcissas encontram-se os valores da relação clorofila-*a*/carbono calculados após a simulação de cada modelo. Já no eixo das ordenadas localiza-se a estimativa da mesma relação, dessa vez obtida pelo modelo de Chapra (1997).

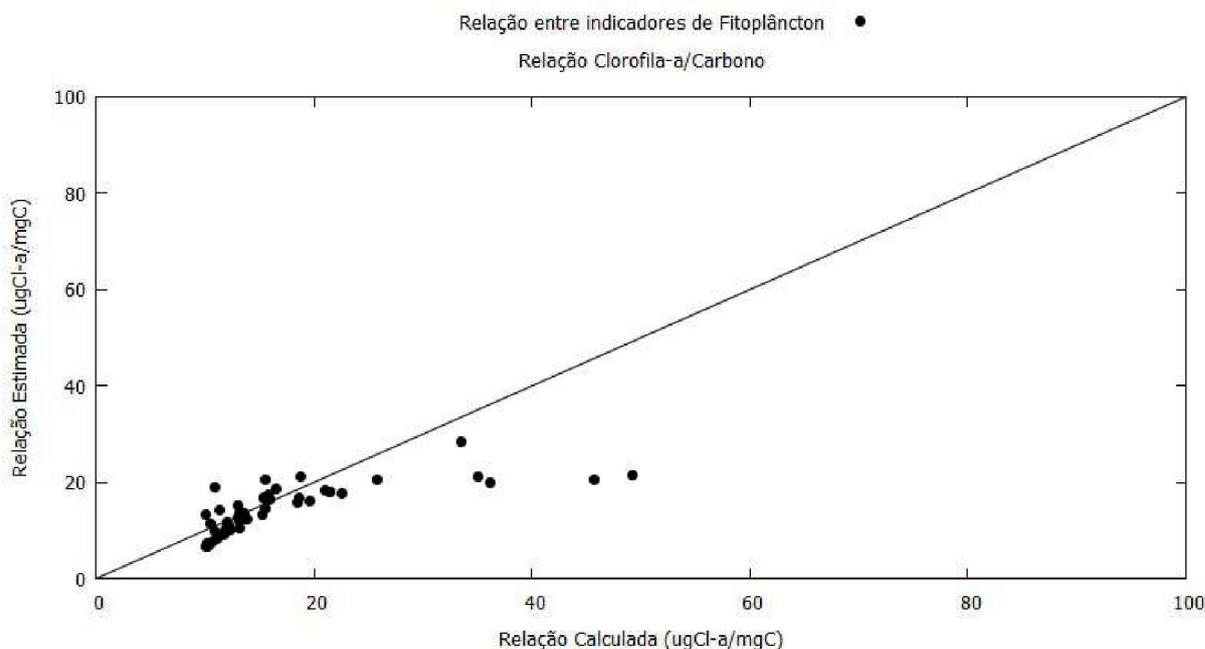


Figura 5.7 – Estimativa das relações de massa do fitoplâncton nos lagos em estudo.

Portanto, é possível observar, na figura 5.7, que as razões entre os indicadores da biomassa do fitoplâncton, obtidos através dos modelos concentrados, e a estimativa da

mesma relação entre esses indicadores, dessa vez computada pela formulação de Chapra (1997), obtiveram uma boa relação. Além disso, não foi possível identificar características similares para os casos em que as relações foram aceitáveis, ou seja, próximo a reta, nem tão pouco foi possível identificar os casos em que as relações se distanciaram da reta. Sobretudo, a relação estimada, que é computada através da formulação proposta (equação 4.97), tende a subestimar a relação entre as biomassas do fitoplâncton, quando comparada a relação calculada.

## 6 Resultados do Modelo Bidimensional

As equações das variáveis de estado baseados nos dois modelos, SisBaHiA<sup>®</sup> (modelo de qualidade de água) e PCLake (modelo ecológico), foram aplicadas num modelo de transporte advectivo-difusivo para corpos d'água misturados na direção vertical, vislumbrando a dinâmica do crescimento do fitoplâncton em função da concentração de nutrientes no meio. Neste capítulo são apresentados os resultados oriundos desses modelos. Os padrões dos sistemas foram os mesmos que os apresentados no capítulo anterior, modificando, evidentemente, as concentrações das respectivas variáveis de estado.

### 6.1 Caracterização do Sistema

A discretização espacial dos cenários constitui a ideia de segmentar um sistema em um número finito de elementos, a fim de representar a equação diferencial por uma solução numérica. O intuito da discretização tem o propósito de simular um reservatório hipotético, com velocidades muito pequenas. A organização desses elementos representa uma malha. Essas equações usam o padrão de circulação obtido em um modelo hidrodinâmico bidimensional (2DH) para o seguinte cenário: domínio com dimensão de 30000 m e largura de até 10800 m (Figura 6.1).

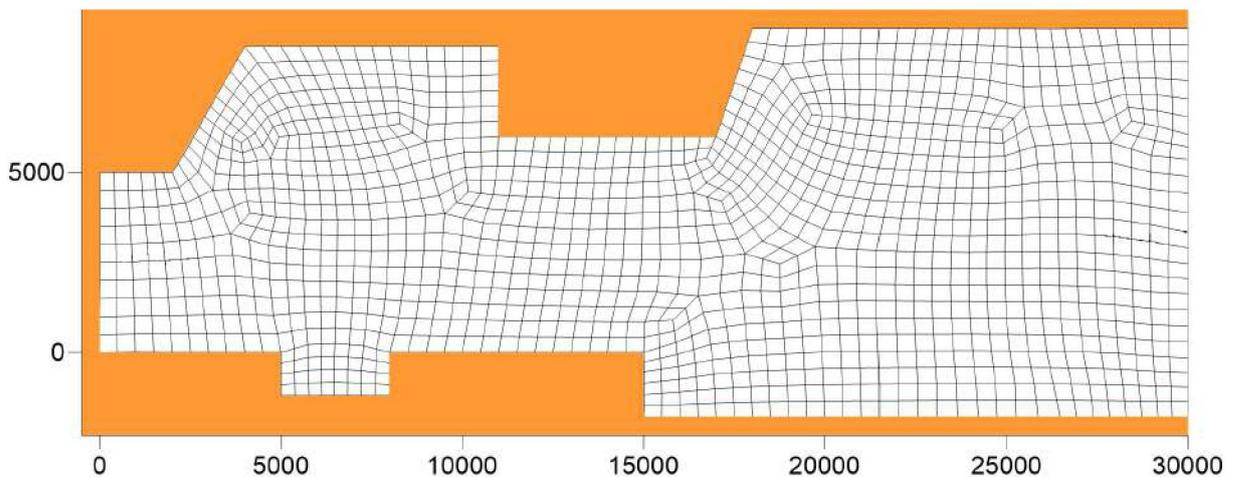


Figura 6.1 – Malha utilizada nas simulações.

Os corpos hídricos dispõem de reentrâncias, as quais provocam mudanças no padrão hidrodinâmico do meio, e como consequência alterações no transporte advectivo das substâncias em estudo. Essas mudanças abruptas no contorno geométrico do corpo hídrico podem colaborar com a mudança na velocidade do fluido, causando aprisionamento ou não das respectivas substâncias.

Na aplicação de um modelo hidrodinâmico 2DH de transporte de nutrientes e fitoplâncton, várias informações são necessárias na entrada do modelo, tais como o contorno e a profundidade do terreno da região simulada, nível da água, além da definição dos parâmetros hidrodinâmicos e biológicos.

O contorno do cenário, representado pela interface terra-água do sistema, foi digitalizado através da construção de malhas do SisBaHiA<sup>®</sup>. O reservatório hipotético apresenta batimetria uniforme, com profundidade de oito metros e boa densidade de pontos na composição da sua malha. A malha utilizada para estudo possui 1419 elementos.

Para a discretização espacial do cenário, os 1419 elementos tem uma área aproximada a um retângulo de 400 x 500 m e que varia de acordo com o elemento, uma vez que não foi utilizada malha retangular uniforme, para este caso específico. Quanto a discretização temporal, foi utilizado um intervalo de tempo de 50 segundos. Para efetuar a simulação de 1 dia (86400 segundos), de um cenário qualquer, o tempo de processamento é de aproximadamente 3 minutos (tempo real).

## 6.2 Perfil Hidrodinâmico

O cenário apresentado na seção anterior foi produzido por uma ferramenta do SisBaHiA<sup>®</sup> que elabora malhas. Além da geração do cenário hipotético, a ferramenta contribui com a organização dos elementos e nós. Os padrões hidrodinâmicos do cenário foram computados através do mesmo *software*, após inserção da vazão de entrada e saída nas fronteiras abertas do volume de controle. O programa identifica as fronteiras fechadas e confere o possível perfil hidrodinâmico dentro desse volume de controle, ou seja, o provável comportamento que o fluido terá nesse ambiente.

Ao final dessa etapa é possível obter as componentes da velocidade nas direções  $x$  e  $y$  em cada um dos 1419 elementos. A partir dessa informação, analisar o transporte advectivo e difusivo das variáveis de estado dentro do corpo hídrico torna-se factível. A figura 6.2 corresponde ao padrão de circulação para o reservatório hipotético proposto.

Possuindo velocidades entre 0,000 e 0,105 m.s<sup>-1</sup>, o domínio conta com características análogas a de um reservatório, ou um lago hipotético, por possuir velocidades baixas e um corpo relativamente extenso. No limite esquerdo do reservatório, precisamente na seção que se estende do ponto (0 m; 0 m) ao ponto (0 m; 5000 m), há um fluxo de entrada no domínio. Essa seção foi admitida como “seção 1” (figura 6.3). Já a seção localizada na extrema direita do reservatório, precisamente entre os pontos (30000 m; -1800m) e (30000 m; 9000 m), possui um fluxo correspondente a saída do fluido. Para essa, foi adotado o termo “seção 2”. As simulações do transporte foram realizadas para um regime permanente de circulação.

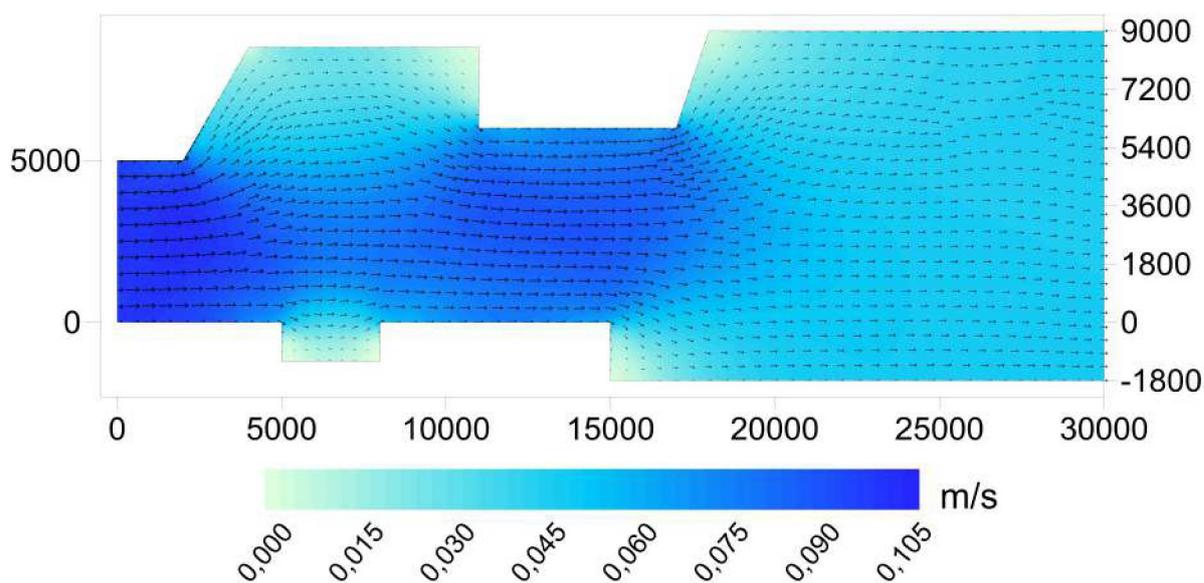


Figura 6.2 – Padrão de circulação hidrodinâmica de um reservatório hipotético.

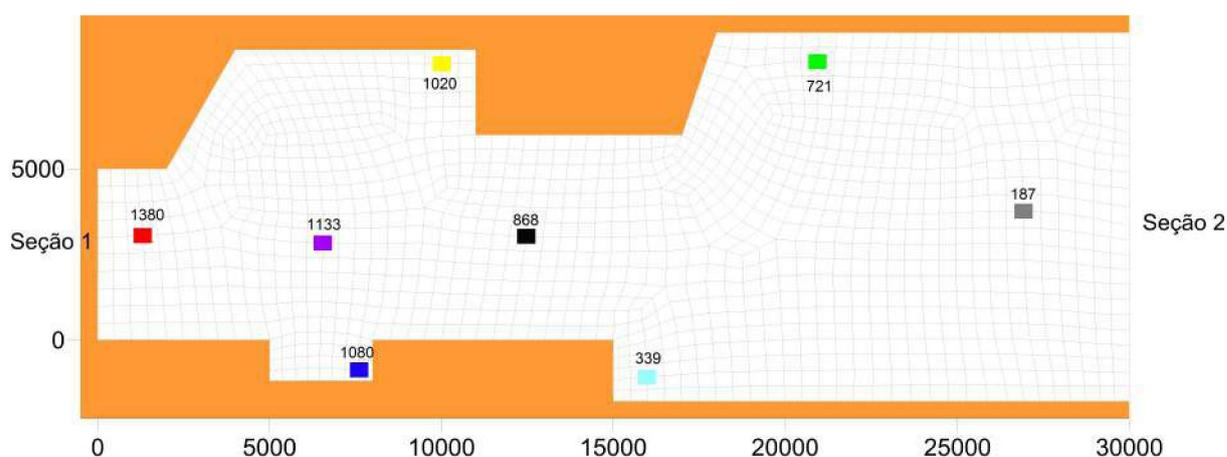


Figura 6.3 – Estações situadas no interior do reservatório.

Além disso, a inserção de estações no interior do reservatório (figura 6.3) é visto como primordial, com intuito de comparar as variáveis de estado ao longo do tempo. Essas estações foram admitidas através do respectivo número do seu nó, porém, desta vez, rearranjadas por cores.

O tempo de residência de um compartimento fluido é tradicionalmente definido como sendo o tempo médio de permanência de uma partícula fluida no compartimento. Usualmente, o tempo de residência é calculado pela razão entre o volume ( $\text{m}^3$ ) do compartimento e o fluxo residual ( $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ) através do compartimento (CUNHA; SCUDELARI; CARRER, 2018). Uma consideração importante em relação a escala temporal é que os poluentes possuem um determinado tempo de residência dentro do sistema, e que uma vez alcançado o sistema possuiria concentração similar a cada variável de estado, em todo seu domínio. A partir de simulações superiores a esse tempo residência, as zonas de baixa velocidade poderiam ter acúmulos das substâncias, devido ao baixo transporte advectivo.

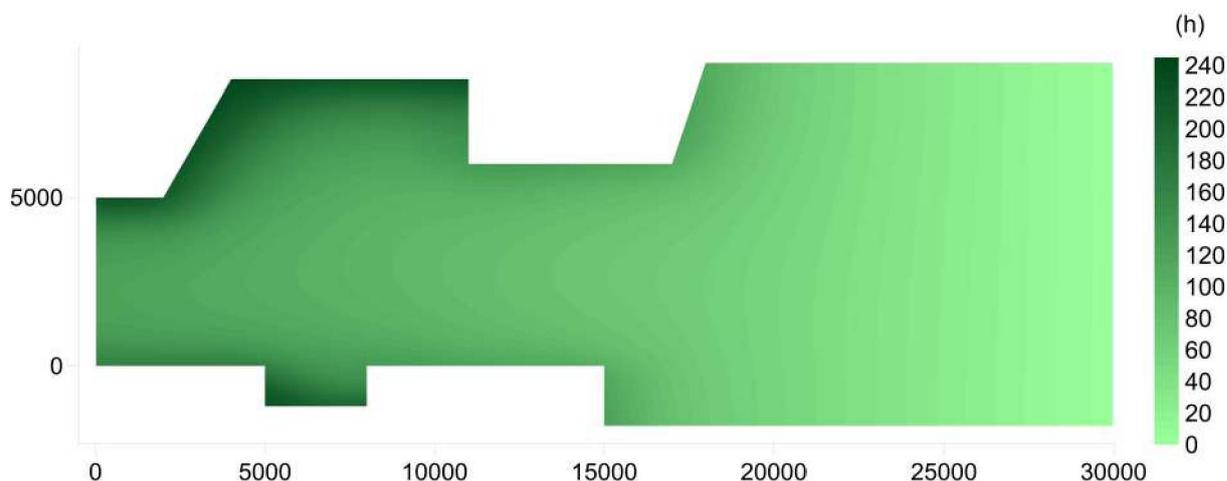


Figura 6.4 – Tempo de residência no corpo hídrico, em horas.

A figura 6.4 representa o tempo de residência ao longo do corpo hídrico. Com base nas definições do tempo de residência do corpo hídrico, foi possível definir a localização das estações e o tempo de simulação. Maiores informações sobre a determinação do tempo de residência podem ser obtidas em Cunha, Scudelari e Carrer (2018).

### 6.3 Condições Iniciais, Condições de Contorno e Dados de Entrada

Na resolução de equações diferenciais, como já visto, é necessário recorrer a métodos numéricos e formalizar as condições iniciais e de contornos do sistema. A partir dessa perspectiva, foi adotado, em todas as simulações, concentrações iniciais nulas para todas as variáveis de estado.

As condições de contorno tratam-se da faixa terra-água do sistema, para este contorno é definido fluxo nulo, quando a componente da velocidade normal ao contorno for nula. Analogamente, as demais condições de contorno são os limites do volume de controle que não pertencem à interface terra-água. Para esses limites a velocidade normal não será nula, portanto haverá fluxo entrando e saindo no sistema, a depender do sentido da normal. Antes de executar a simulação, é necessário indicar, num dos arquivos de entrada, quais os elementos pertencentes ao contorno, o ângulo da direção normal a velocidade, identificar se existe fluxo de entrada nesse respectivo elemento, e se houver, apresentar a concentração da variável de estado correspondente.

Quanto aos dados de entrada do modelo, na seção 1, foi adotado um fluido com as características apresentadas na tabela 6.1, onde as variáveis de estado da tabela representam, respectivamente, amônia ( $C_1$ ), nitrato ( $C_2$ ), fósforo inorgânico ( $C_3$ ), nitrogênio orgânico ( $C_7$ ), fósforo orgânico ( $C_8$ ), clorofila-*a* ( $C_9$ ) e carbono ( $C_{10}$ ).

Tabela 6.1 – Concentrações das substâncias na seção 1.

C <sub>1</sub> (mg.l <sup>-1</sup> )	C <sub>2</sub> (mg.l <sup>-1</sup> )	C <sub>3</sub> (mg.l <sup>-1</sup> )	C <sub>7</sub> (mg.l <sup>-1</sup> )	C <sub>8</sub> (mg.l <sup>-1</sup> )	C <sub>9</sub> (μg.l <sup>-1</sup> )	C <sub>10</sub> (mg.l <sup>-1</sup> )
0,35	0,15	0,001	0,5	0,01	0,5	0,05

Os parâmetros biológicos utilizados nos modelos são os mesmos utilizados no modelo concentrado (tabelas 5.3 e 5.4). Porém, as razões nutriente/biomassa discutidas no capítulo anterior, foram mantidas, ainda assim, como as médias das razões máximas e mínimas para cada substância (nitrogênio e fósforo). Além disso, para ambos modelos, foram admitidos os seguintes coeficientes de difusão: no sentido  $x$ , uma difusão de 5,0 m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup> e para o sentido  $y$ , uma difusão de 1,0 m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>.

## 6.4 Simulações do Nitrogênio e Fósforo

Os resultados para as concentrações dos nutrientes são apresentados nesta seção, de modo que as simulações foram exibidas lado a lado para que possibilite a comparação entre os modelos em diferentes medidas de tempo (6, 24, 120 e 240 horas, respectivamente).

### 6.4.1 Nitrogênio

As quatro colunas da esquerda das figuras 6.5, 6.6 e 6.7 representam os resultados da simulação do nitrogênio orgânico, amônia e nitrato que utilizam as equações de qualidade da água do SisBaHiA<sup>®</sup>. Enquanto que as figuras da direita representam as simulações feitas a partir das formulações do PCLake. Pode ser observado nas figuras 6.5, 6.6 e 6.7 que os valores simulados das distintas formas do nitrogênio (nitrogênio orgânico, amônia e nitrato) são similares entre os modelos.

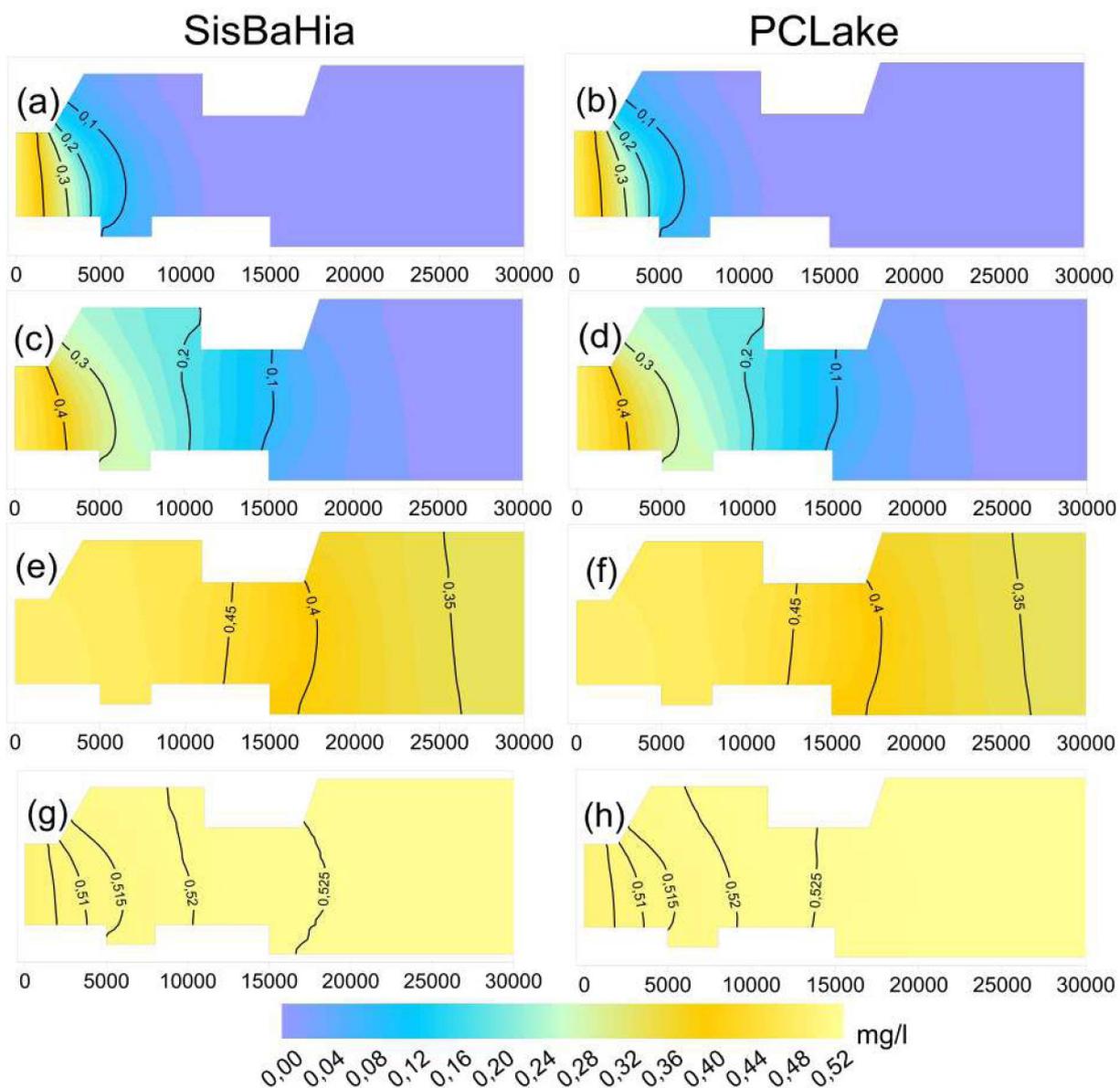


Figura 6.5 – Distribuição espacial da concentração de nitrogênio orgânico num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHia<sup>®</sup>, os da direita do PCLake.

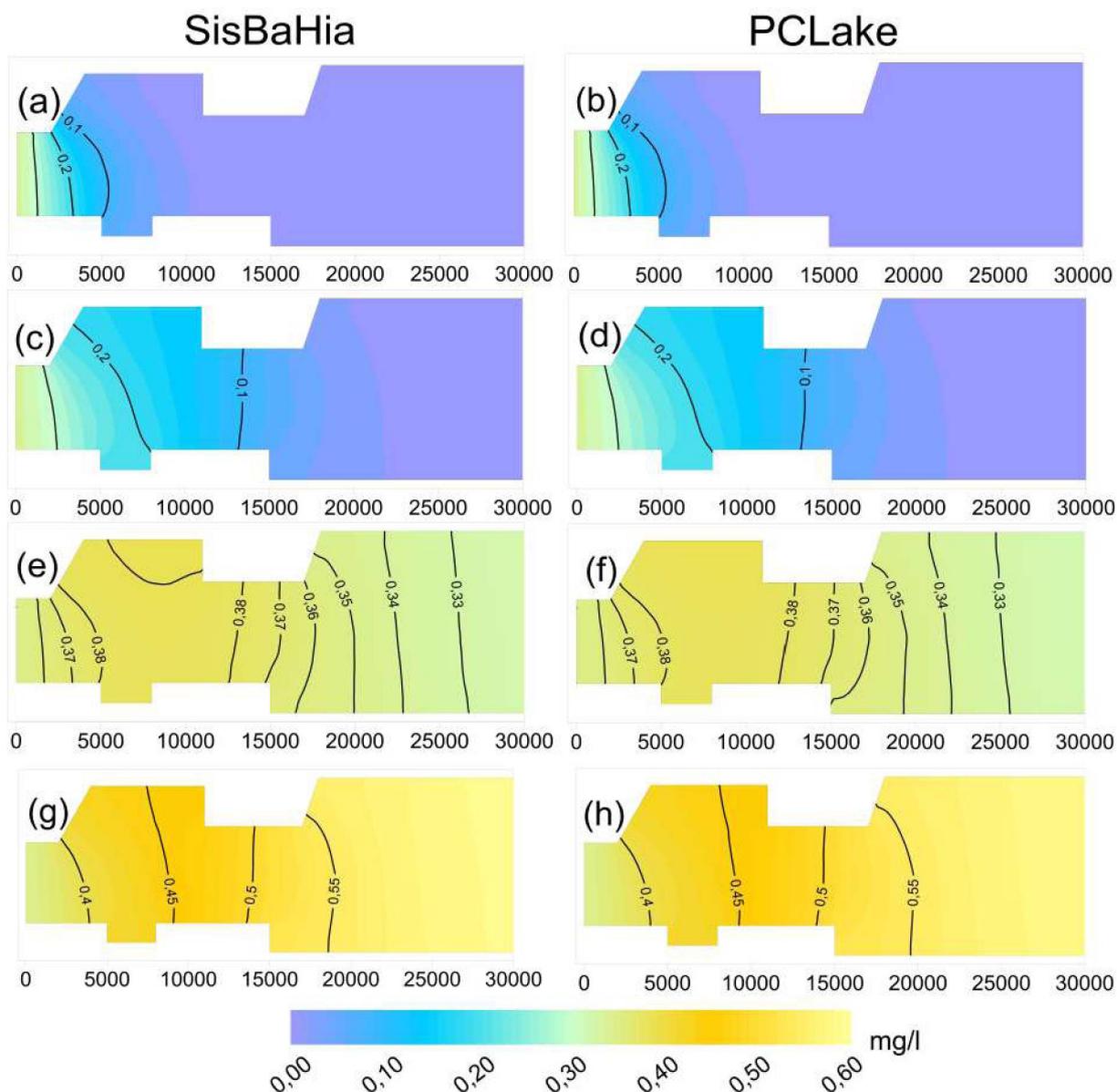


Figura 6.6 – Distribuição espacial da concentração de nitrogênio amoniacal num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHia<sup>®</sup>, os da direita do PCLake.

As variações ao longo do tempo para as demais variedades do nitrogênio (nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal e nitrato) possuíram equivalência entre os modelos. De um lado, o crescimento algal determinado pela formulação do SisBaHia<sup>®</sup> utiliza fator mínimo para desenvolver sua população, ou seja, só há consumo do nutriente que apresenta menor concentração disponível, portanto o fósforo inorgânico possui valor inferior aos compostos inorgânicos nitrogenados, sendo utilizado como nutriente para crescimento da biomassa fitoplanctônica. Por outro lado, as formulações do PCLake destacam prioridade no crescimento algal a partir do mesmo nutriente, fósforo inorgânico. Portanto, o consumo dos nutrientes oriundos do nitrogênio, para esses casos foram baixos.

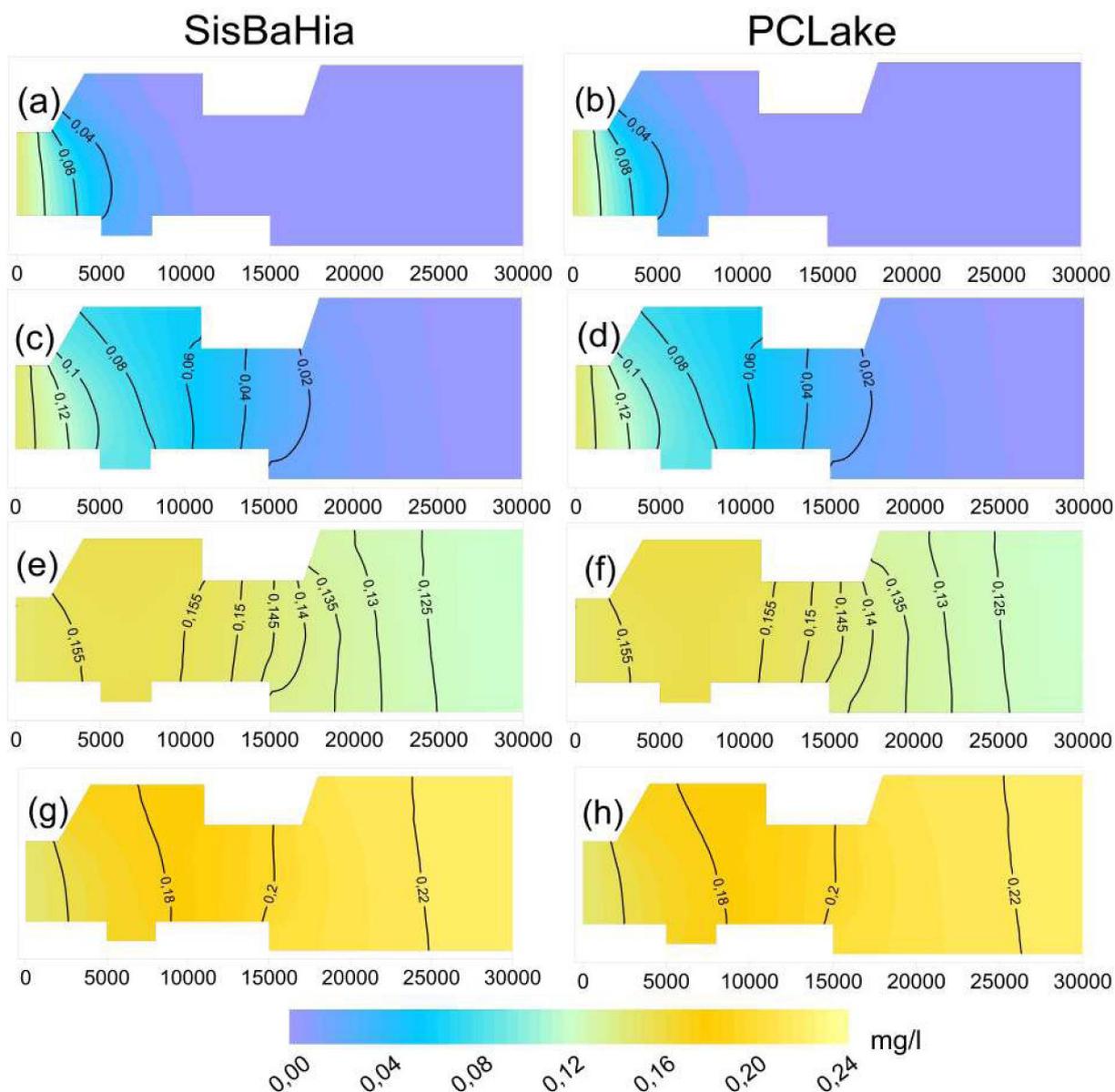


Figura 6.7 – Distribuição espacial da concentração de nitrato num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHiA<sup>®</sup>, os da direita do PCLake.

É evidente que o nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal e o nitrato simulados possuem certa aglomeração na mesma faixa apresentada (entre 5000 m e 10000 m). Além disso, o nitrogênio amoniacal, quando simulado pela equação baseada nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup>, apresentou maior acúmulo numa das reentrâncias do reservatório (figura 6.6.e), devido a rápida transferência da variável de estado em relação ao PCLake. Além disso, as concentrações das substâncias no interior do reservatório, após determinado tempo, é maior que as cargas de entrada do modelo.

Outra forma de verificar o padrão de crescimento das concentrações dessas substâncias é através das estações inseridas no reservatório. Essas estações computam as con-

centrações ao longo do tempo, e tornam-se úteis nas comparações das simulações entre os modelos. A figura 6.8 apresenta o comportamento do nitrogênio orgânico, amônia e nitrato ao longo do tempo. Para cada uma dessas substâncias foram utilizadas duas estações e comparadas com as mesmas estações do modelo que utiliza como base outras formulações.

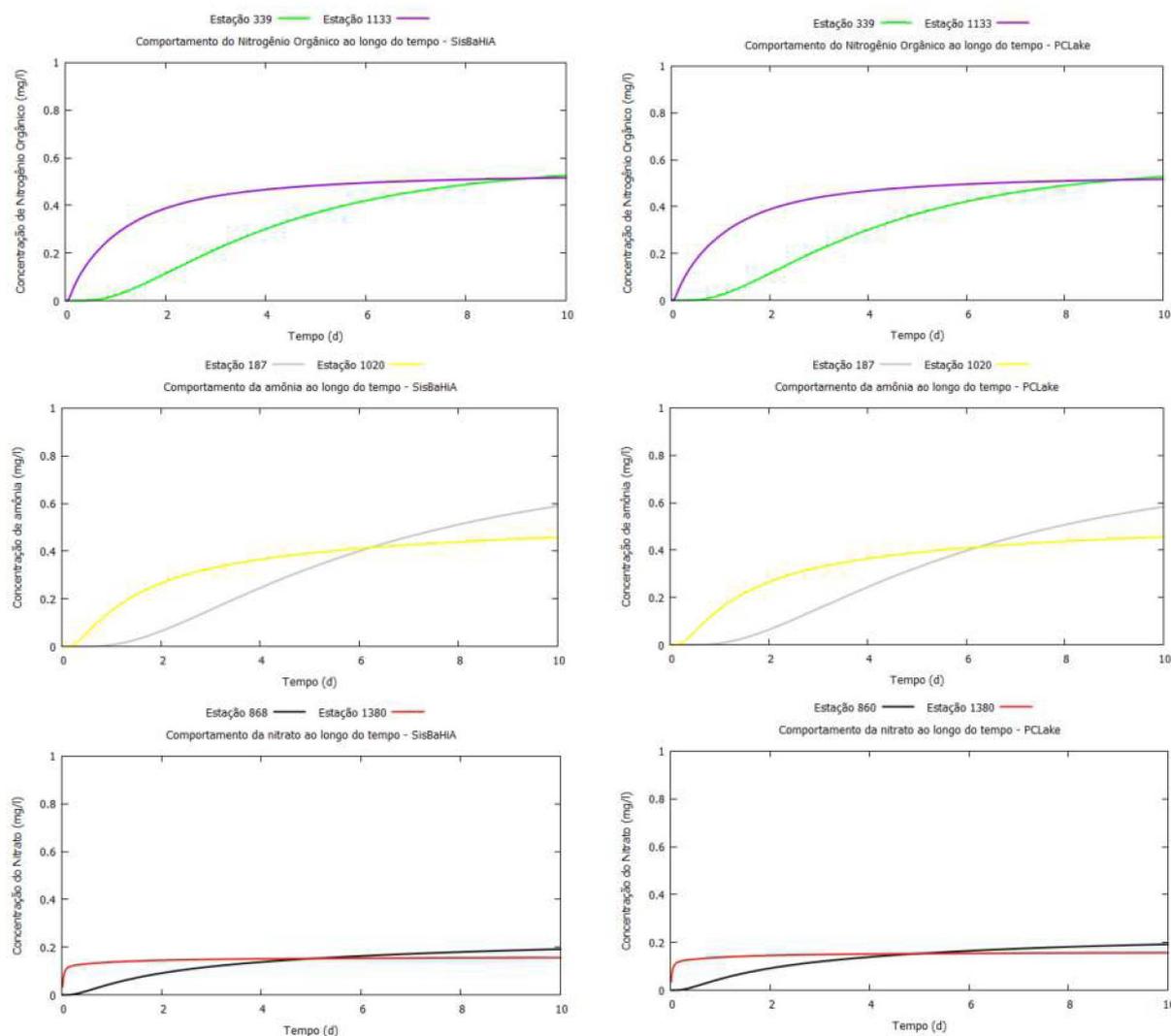


Figura 6.8 – Distribuição das concentrações de nitrogênio orgânico, amônia e nitrato em diferentes estações durante 10 dias.

#### 6.4.2 Fósforo

As distribuições espaciais das simulações referentes ao fósforo são apresentadas nas figuras 6.9 e 6.10, de modo que os resultados da simulação do fósforo orgânico e fósforo inorgânico, que utilizam das equações de qualidade da água do SisBaHiA<sup>®</sup>, encontram-se nas subfiguras *a*, *c*, *e* e *g*. Enquanto que as figuras da direita (*b*, *d*, *f* e *h*) representam as simulações baseadas nas formulações do PCLake. Nessas figuras, os valores simulados para o fósforo orgânico e fósforo inorgânico são equivalentes entre os modelos.

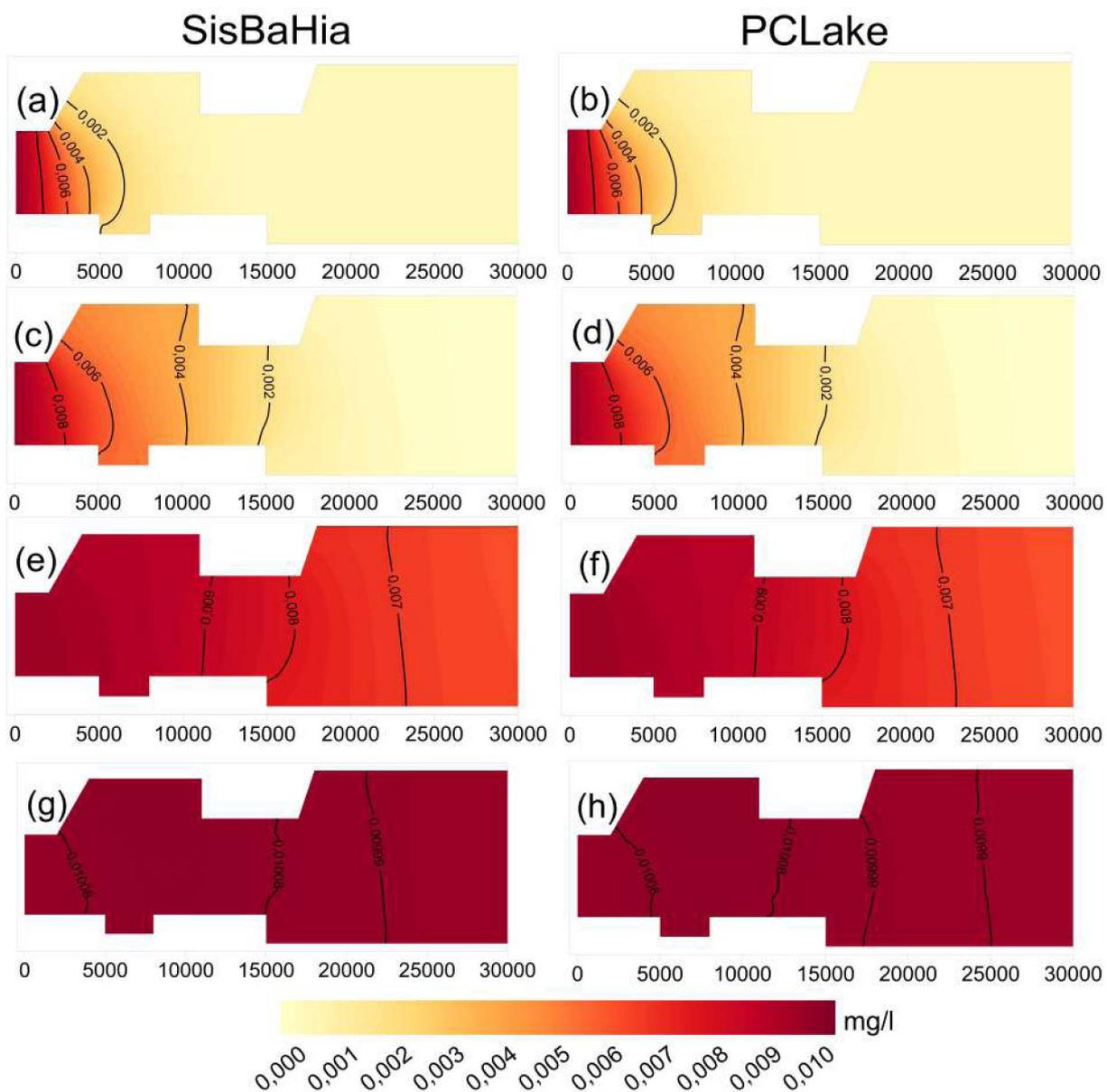


Figura 6.9 – Distribuição espacial da concentração de fósforo orgânico num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHia<sup>®</sup>, os da direita do PCLake.

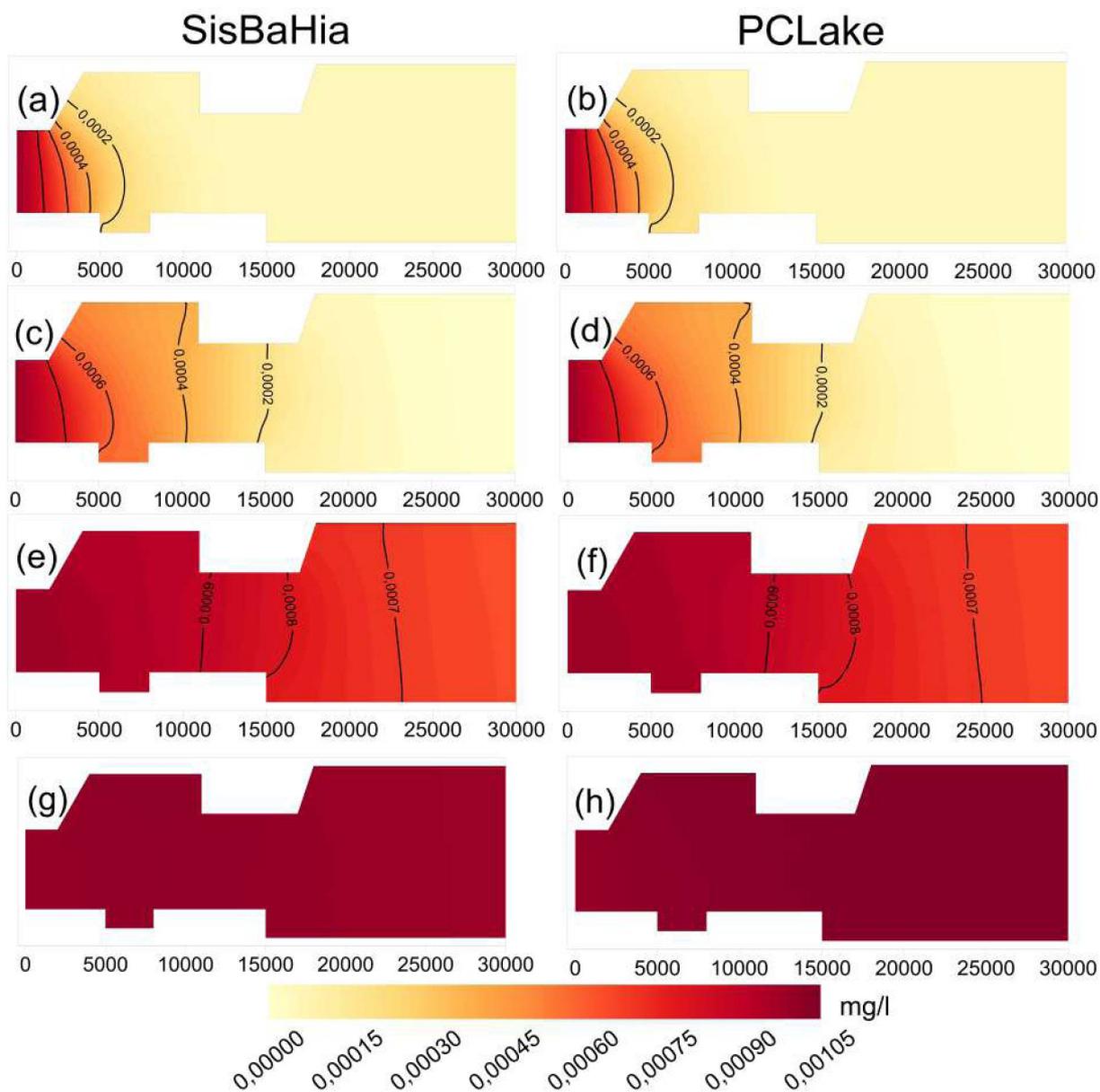


Figura 6.10 – Distribuição espacial da concentração de fósforo inorgânico – ortofosfato – num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) e (b) 6 horas; (c) e (d) 24 horas; (e) e (f) 120 horas; e (g) e (h) 240 horas. Os mapas a esquerda representam as simulações feitas pelas equações do SisBaHiA<sup>®</sup>, os da direita do PCLake.

Os compostos do ciclo do fósforo simulados também possuíam certa aglomeração na mesma faixa apresentada para os compostos do ciclo do nitrogênio (entre 5000 m e 10000 m). Além do mais, esses compostos apresentaram características similares de crescimento e estabilização no sistema.

Como visto nos cenários apresentados, as zonas de acúmulo de nutrientes não foram reproduzidas no modelo de forma localizada ou pontual (exemplo do canto superior da figura 6.6.e). Entretanto, os modelos reproduziram os efeitos das plumas dos respectivos poluentes no interior do reservatório. Inicialmente, as plumas foram observadas pela

diferença de concentração entre as condições iniciais do sistema e as cargas poluidoras inseridas no reservatório. Além disso, durante o transporte de massa dos poluentes, as reentrâncias possuíram papel importante no aprisionamento dessas cargas, principalmente nas regiões entre 5000 m e 10000 m. A partir dos cinco primeiros dias (120 h) há início no processo de estabilização do sistema para grande parte do domínio.

Ao observar o aumento das concentrações de fósforo através das estações, é possível verificar que o crescimento ocorre de forma similar entre os modelos. A figura 6.11 apresenta o comportamento do fósforo orgânico e do fósforo inorgânico (ortofosfato) ao longo do tempo. Para cada uma dessas substâncias foram utilizadas duas estações e comparadas com as mesmas estações do modelo que utiliza como base outras formulações.

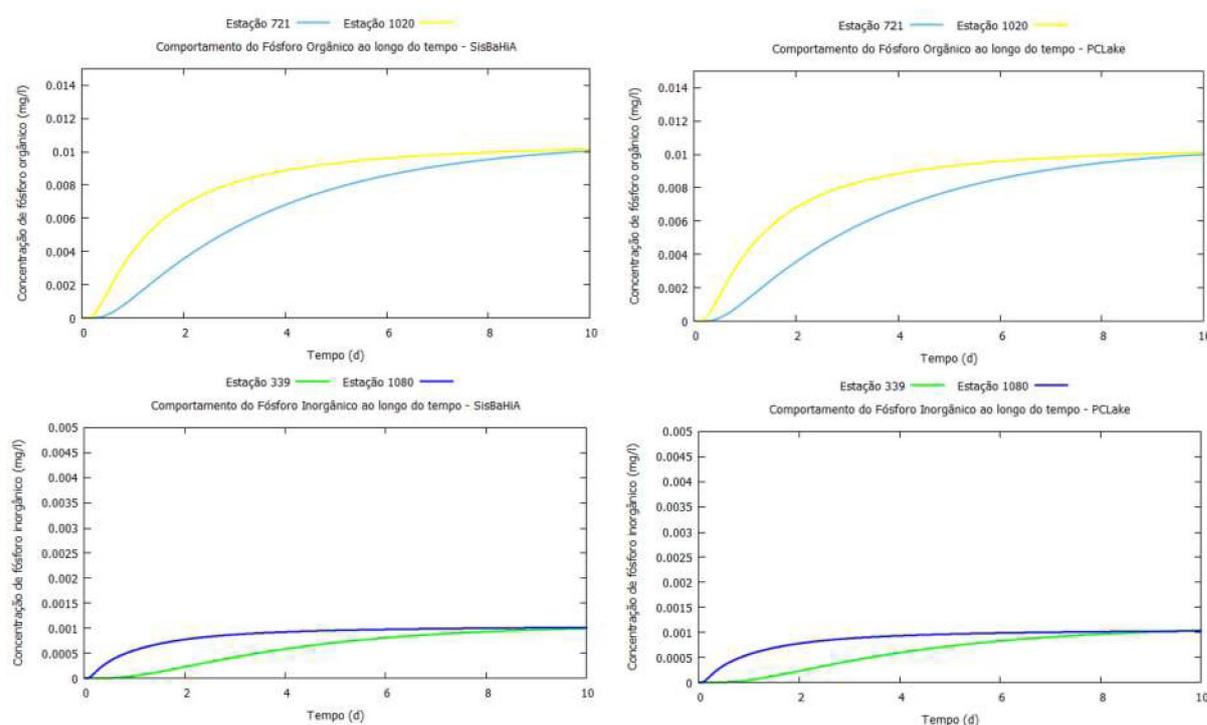


Figura 6.11 – Distribuição das concentrações de fósforo orgânico e fósforo inorgânico em diferentes estações durante 10 dias.

## 6.5 Simulações do Fitoplâncton

No capítulo anterior foram investigados os mecanismos locais que controlam o desenvolvimento da população de fitoplâncton e como esses mecanismos se comportam devido a razão nutriente/biomassa desses organismos, e como essa razão influencia na taxa efetiva de crescimento da população algal. Essa seção apresenta os padrões de transporte, crescimento e consumo de fitoplâncton, além da sua interação com os nutrientes (fósforo e nitrogênio) através do modelo ecológico representado por suas respectivas equações. A simulação consolida aos processos de ganho e perda da população de fitoplâncton e aos

efeitos do transporte devido a advecção e difusão. Essas simulações visaram investigar como o acúmulo de nutrientes interfere na taxa efetiva de crescimento de fitoplâncton.

Foi possível analisar ainda, de maneira mais detalhada, como os processos relacionados a perdas (respiração, mortalidade, excreção) e ganhos (fotossíntese) de biomassa fitoplanctônica operam no corpo d'água.

O tempo total de simulação do cenário foi de 240 horas (10 dias), num passo de tempo de 50 segundos, e iniciando a execução do modelo como condição de concentrações nulas para todas as variáveis de estado em seu domínio. Os quadros das figuras 6.12 mostram os campos de concentração de fitoplâncton indicado pela clorofila-*a* (vide equações do SisBaHiA<sup>®</sup>). Por outro lado, as figuras 6.13 apresentam os campos de concentração indicados pelo carbono (vide equações do PCLake).

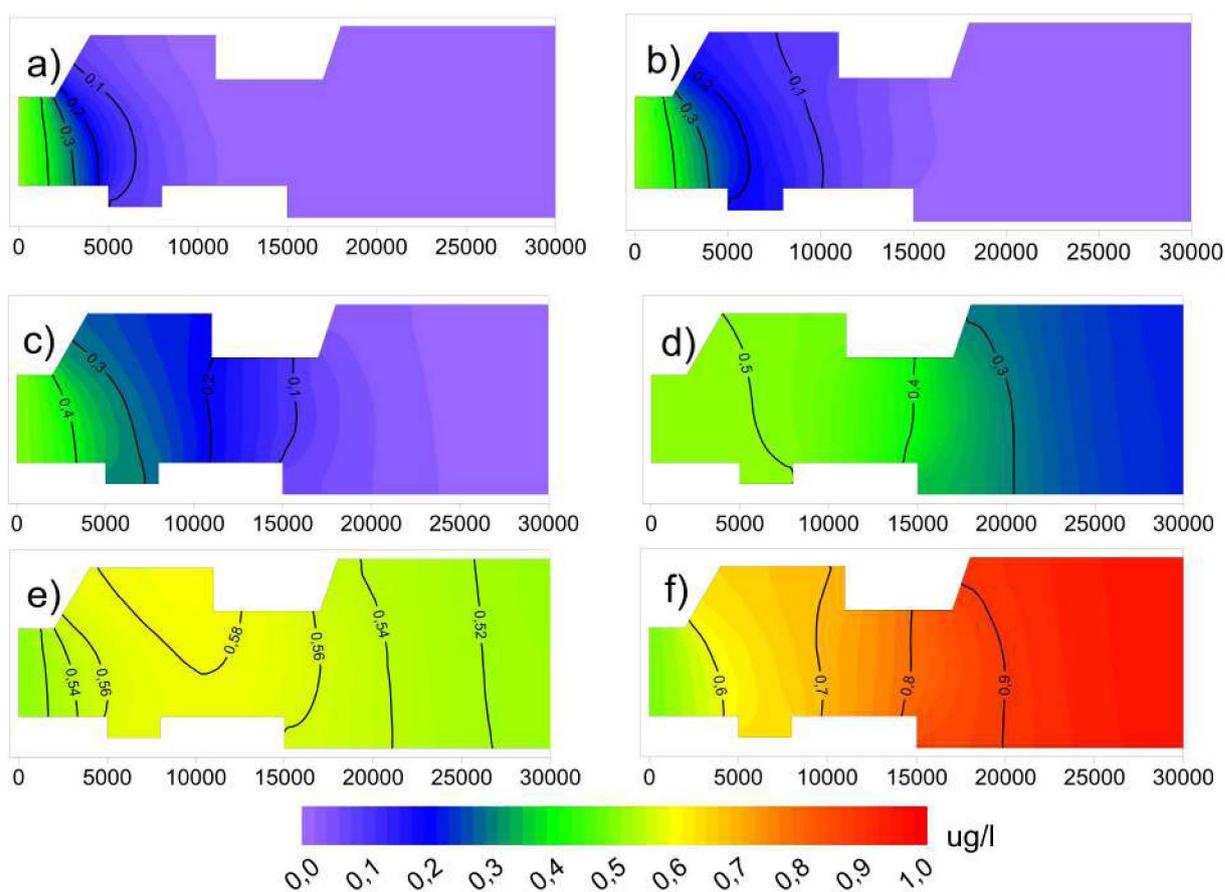


Figura 6.12 – Distribuição espacial da biomassa de fitoplâncton, indicado pela clorofila-*a*, num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) 6 horas; (b) 12 horas; (c) 24 horas; (d) 72 horas; (e) 120 horas e (f) 240 horas. A escala de cores indica que as células em vermelho, laranja, amarelo, verde, azul e roxo têm concentrações entre  $0 \mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$  e  $1 \mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$ .

Ao longo do tempo é possível perceber que as zonas com velocidades mais baixas não possuem concentrações maiores que as demais regiões, porém a parte das figuras 6.12 e 6.13, que determinam a simulação após 120 horas (5 dias) do início do sistema, torna-se

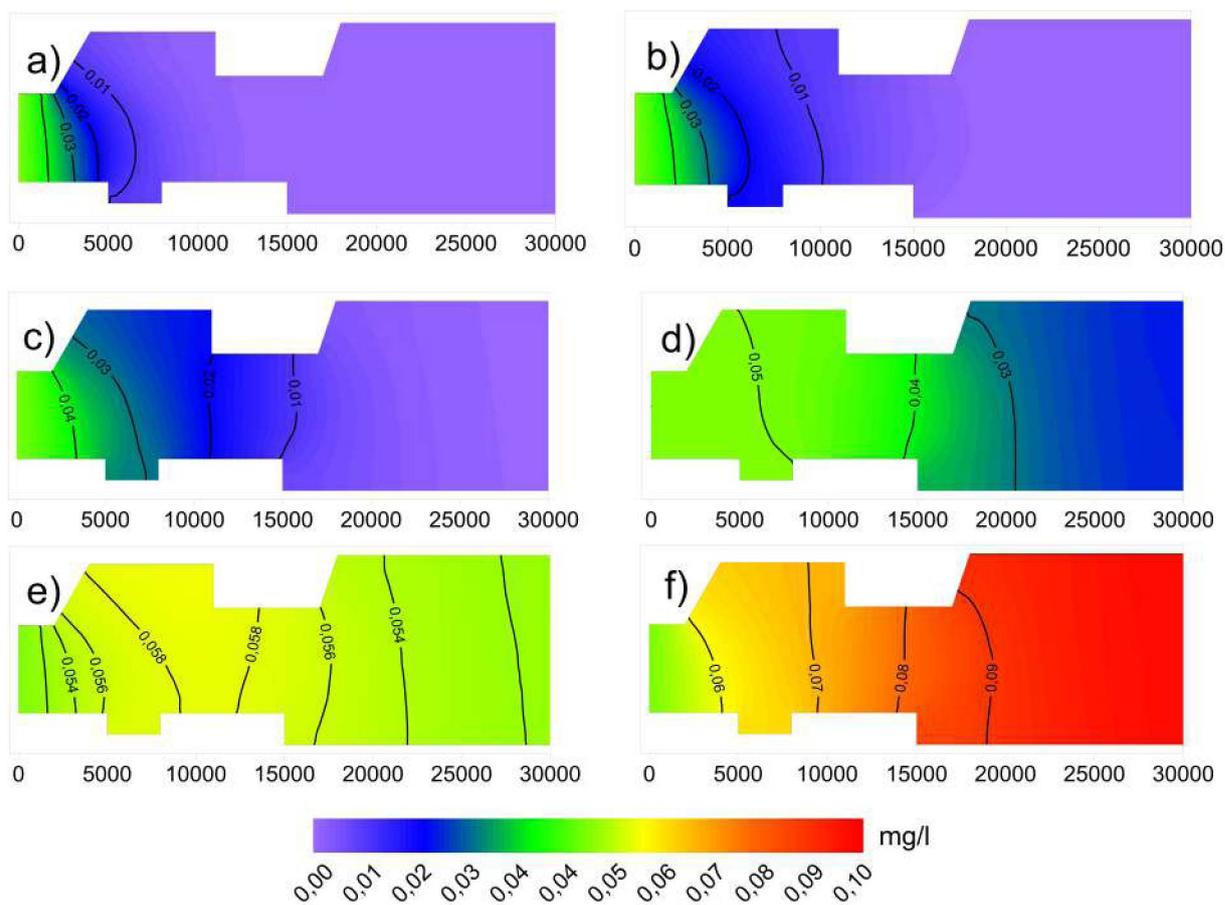


Figura 6.13 – Distribuição espacial da biomassa de fitoplâncton, indicado pelo carbono, num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) 6 horas; (b) 12 horas; (c) 24 horas; (d) 72 horas; (e) 120 horas e (f) 240 horas. A escala de cores indica que as células em vermelho, laranja, amarelo, verde, azul e roxo têm concentrações entre  $0 \text{ mg.l}^{-1}$  e  $0,1 \text{ mg.l}^{-1}$ .

possível de identificar certo acúmulo de fitoplâncton na faixa entre 5000 m e 10000 m, e grande parte desse crescimento ocorre nas regiões de baixa circulação.

As regiões mais próximas aos limites geométricos do volume de controle apresentam condições mais favoráveis para crescimento fitoplanctônico, uma vez que possuem baixas velocidades, porém esse crescimento ocorre por toda a seção do reservatório, não somente nas regiões com baixo transporte advectivo.

## 6.6 Estimativa de Carbono Indicando Comunidade Fitoplanctônica

A estimativa da população de algas, indicada pela concentração de carbono, se deu por intermédio da equação 4.97 (equação proposta neste trabalho), que relaciona os diferentes indicadores de fitoplâncton como função da quantidade de nutrientes no meio e da taxa de crescimento algal. Nessas simulações, foi possível analisar, como essa estimativa se dá sem considerar os processos relacionados a perdas (respiração, mortalidade,

excreção), uma vez que estas não fazem parte da função (figura 6.14).

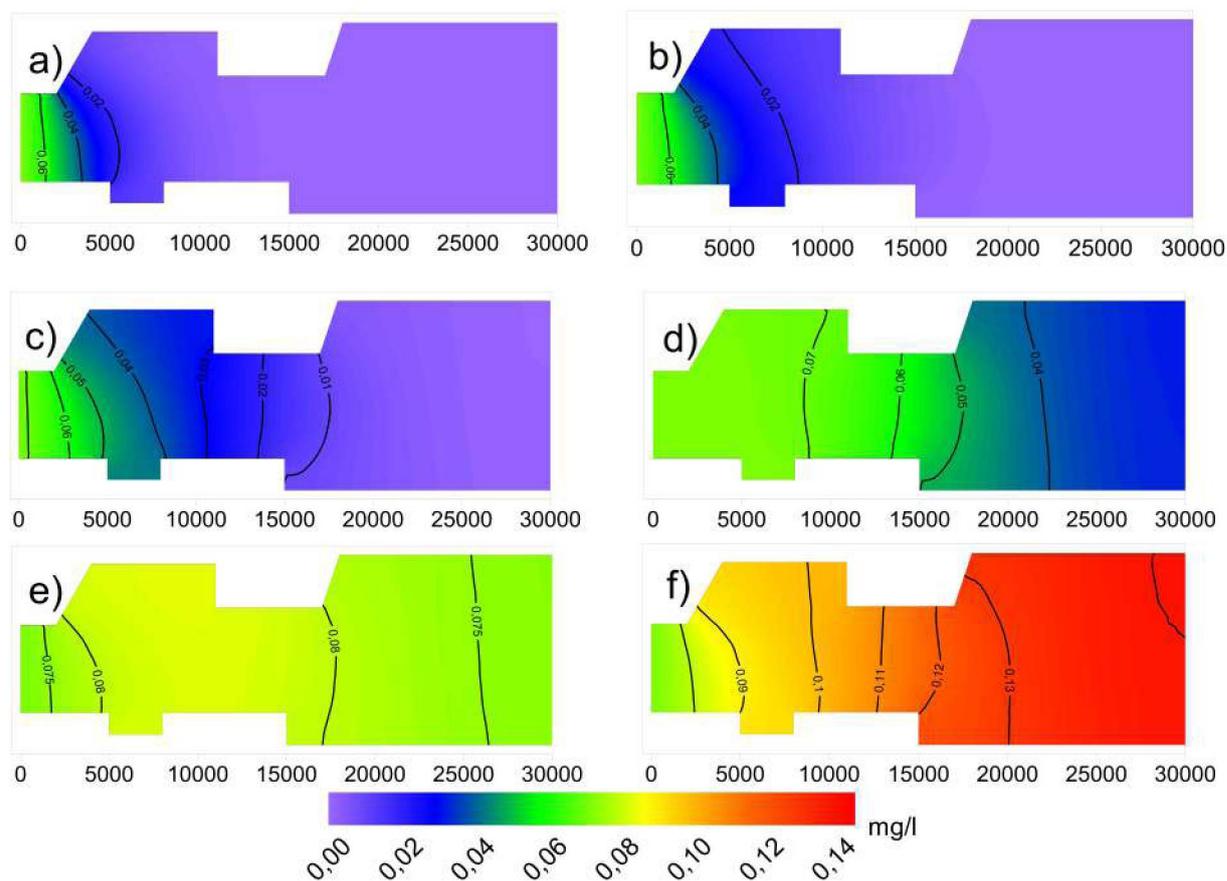


Figura 6.14 – Distribuição espacial da biomassa de fitoplâncton, indicado pelo carbono, segundo a equação de Chapra (Equação 4.97), num reservatório hipotético ao longo do tempo: (a) 6 horas; (b) 12 horas; (c) 24 horas; (d) 72 horas; (e) 120 horas e (f) 240 horas. A escala de cores indica que as células em vermelho, laranja, amarelo, verde, azul e roxo têm concentrações entre  $0 \text{ mg.l}^{-1}$  e  $0,14 \text{ mg.l}^{-1}$ .

Como nos casos de dispersão da variável de estado (carbono), a carga impõe no sistema um gradiente de concentrações que se inicia a 0 m e estende até seu outro extremo (30000 m), porém em alguns momentos, tornam-se zonas de acúmulo de substâncias. Como visto, o padrão de dispersão algal foi repetida próximo ao apresentado pelas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> e do PCLake, porém com concentrações distintas, quando comparadas a simulação feita utilizando as formulações do PCLake (modelo que utiliza o carbono como indicativo da presença de fitoplâncton).

Para isso, foram construídos gráficos da variação temporal do fitoplâncton (estimado pela equação de Chapra (1997)) nas estações, no interior do reservatório. Os gráficos mostrados na figura 6.15 tem o propósito de comparar o crescimento algal entre as formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> (indicando carbono, através da equação 4.97) e as formulações baseadas no PCLake.

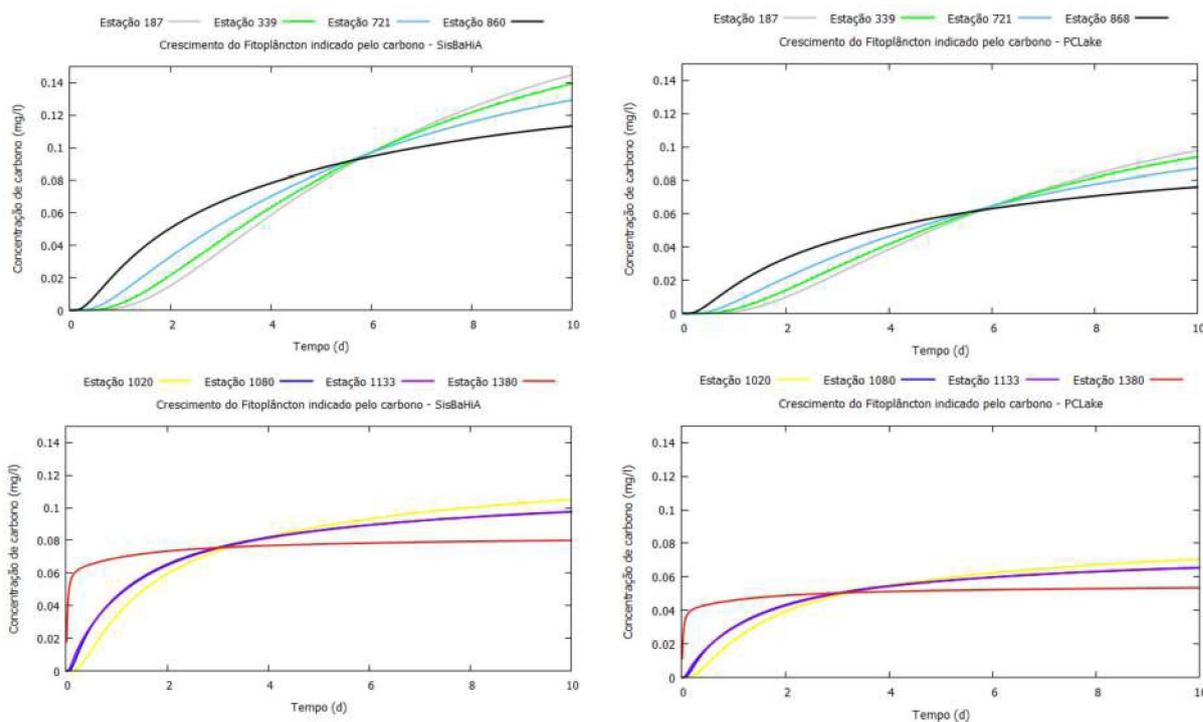


Figura 6.15 – Distribuição temporal das concentrações de fitoplâncton, durante 10 dias, em modelos de crescimento algal com formulações distintas.

Portanto, como apresentados em outros cenários, o modelo oriundo da formulação do SisBaHiA<sup>®</sup>, indicado pela presença de carbono, seguiu analogamente a pluma exibida na figura 6.13. Além disso, seguiu o comportamento temporal apresentado nas estações. Porém, para este caso, o modelo construído com base nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> e que simula as concentrações de carbono (indicador da presença de fitoplâncton), através da equação 4.97, obteve concentrações superiores em até 40% das concentrações previstas na simulação decorrente das formulações do PCLake.

## 7 Conclusões e recomendações

Este trabalho teve como objetivo investigar a influência da circulação hidrodinâmica sobre os processos de crescimento fitoplanctônico em corpos d'água, em especial nas regiões de estagnação, e aplicar as duas formulações para estimar a dinâmica da biomassa do fitoplâncton a partir dos mecanismos relacionados ao transporte, crescimento e perdas de sua biomassa.

As formulações que foram implementadas no modelo bidimensional indicam que o crescimento do fitoplâncton apresentaram resultados análogos em toda simulação, uma vez que a distribuição espacial e temporal tiveram o mesmo comportamento. Isso se deve ao fato da concentração de fósforo inorgânico ser menor que as concentrações de nitrogênio amoniacal e nitrato, permitindo assim que o crescimento, segundo a formulação do SisBaHiA<sup>®</sup>, seja limitado ao fósforo. Dessa forma, quando compara-se a outra formulação de crescimento algal, as concentrações são similares, tendo em vista que o consumo de fósforo inorgânico influencia o crescimento da biomassa de forma superior ao nitrogênio amoniacal e nitrato, uma vez que essa formulação induz o uso do fósforo inorgânico por ser energeticamente mais vantajoso para o organismo.

Tendo em vista que a relação definida entre carbono e clorofila-*a* utiliza somente o nitrogênio como nutriente influenciador nessa relação entre as biomassas, a substituição desse nutriente pela função mínima entre dois nutrientes (nitrogênio e fósforo) se deu de forma satisfatória. Portanto, a equação proposta por Chapra (1997) é funcional para modelos que utilizam transporte advectivo-difusivo, porém seria mais pertinente averiguar a relação que utiliza os dois nutrientes como propulsores da produção primária, ou seja, a equação do crescimento fitoplanctônico manipulado pelo PCLake, uma vez que essa se dá pelo produto entre os dois nutrientes, ou seja, o consumo do nutriente disponível na coluna d'água.

A formulação do SisBaHiA<sup>®</sup> que visa estimar a concentração de fitoplâncton, indicado pelo carbono, através da formulação de Chapra (1997), foi capaz de representar o padrão obtido pelo modelo que simula o organismo através das formulações do PCLake. Considerando que foram utilizadas duas formulações para o crescimento algal, onde uma recorre ao fator mínimo de nutrientes disponíveis para elevar sua população, uma possível alteração na formulação da estimativa pode aprimorar a situação obtida neste trabalho. Uma possível mudança para aprimorar a estimativa de carbono seria a utilização da equação do crescimento do PCLake (equação 4.73) nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup>.

No experimento que considera o reservatório hipotético, os modelos identificaram zonas de acúmulo no domínio. Através das figuras 6.8, 6.11 e 6.15 é possível identificar

estagnação do sistema, tendo em vista o comportamento dos poluentes nas estações 187, 1020, 1030, 1133 e 1380, ao longo do tempo. A proporção entre o transporte advectivo e difusivo deve ser levantada para trabalhos futuros, tendo em vista que o transporte difusivo pode não ter sido suficiente para gerar zonas de acúmulo de nutrientes nas reentrâncias de maneira mais notória.

Uma outra consideração razoável para estabelecer essas zonas de acúmulo, pode ser testada através do aumento do tempo de residência do sistema. Além disso, a modificação da batimetria no domínio, impondo ambientes mais rasos, propõe que a rugosidade influencia de maneira acentuada a hidrodinâmica local, e como consequência o transporte dessas substâncias.

## Referências

- ALDENBERG, T. De tweede stap op weg naar een plankton-detritus model voor loosdrecht (2): elementaire procesformuleringen. *Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu – RIMV*, 1987a.
- ALDENBERG, T. De tweede stap op weg naar een plankton-detritus model voor loosdrecht: koppeling van de koolstof en de fosforcyclus. *Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu – RIMV*, 1987b.
- ALDENBERG, T.; PETERS, J. S. On relation empirical water quality diagrams and plankton-dynamical models: the sample methodology applied to a drinking water storage reservoir. *Archiv für Hydrobiologie–BeihefteErgebnisse der Limnologie*, 1989.
- BOWIE, G. L.; MILLS, W. B.; PORCELLA, D. B.; CAMPBELL, C. L.; PAGENKOPF, J. R.; RUPP, G. L.; JOHNSON, K. M.; CHAN, P. W. H.; GHERINI, S. A. *Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling*. New York, NY, USA: United States Environmental Protection Agency - EPA/600/3-85/040, 1985.
- CARPENTER, S. R.; CARACO, N. F.; CORREL, D. L.; HOWARTH, R. W.; SHARPLEY, A. N.; SMITH, V. H. Nonpoint pollution of surface waters with phosphorus and nitrogen. *Ecological Applications*, v. 8(3), p. 559 – 568, 1998.
- CHAPRA, S. C. *Surface water-quality modeling*. [S.l.]: WCB MacGraw-Hill, 1997. 615 p.
- CHEN, L.; YANG, Z.; LIU, H. Assessing the eutrophication risk of the danjiangkou reservoir based on the efdc model. *Ecological Engineering*, v. 96, p. 117 – 127, Novembro 2016.
- CUNHA, C. L. N. *Desenvolvimento de um modelo hidrodinâmico tridimensional sem aproximação hidrostática*. Tese (Doutorado) — COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro/UFRJ, 2000.
- CUNHA, C. L. N.; MONTEIRO, T. C. N.; ROSMAN, P. C. C. Modelagem bidimensional de transporte de escalares não-conservativos em corpos d'água rasos. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 7, p. 63 – 79, 2002.
- CUNHA, C. L. N.; ROSMAN, P. C. C.; FERREIRA, A. P.; MONTEIRO, T. C. N. Hydrodynamics and water quality models applied to sepetiba bay. *Continental Shelf Research*, v. 26, p. 1940 – 1953, Agosto 2006.
- CUNHA, C. L. N.; SCUDELARI, A. C.; CARRER, J. A. M. Investigação dos efeitos da circulação hidrodinâmica no transporte de massa. *XXVIII Congresso Latinoamericano de Hidráulica*, Setembro 2018.
- DAVIS, C. C. Evidence for the eutrophication of lake erie from phytoplankton records. *Limnology and Oceanography*, IX, n. 3, p. 275 – 283, 1964.
- EDMONDSON, W. T.; ANDERSON, G. C.; PETERSON, D. R. Artificial eutrophication of lake washington. *Limnology and Oceanography*, p. 47 – 53, 1956.

- ESTEVEVES, F. A. *Fundamentos de Limnologia*. 1. ed. [S.l.]: Editora Interciência/FINEP, 1988.
- FISCHER, H. B.; LIST, E.; KOH, C. Y.; IMBERGER, J.; BROOKS, N. H. Mixing in inland and coastal water. *Academic Press Inc.*, p. 138 – 151, Janeiro 1979.
- FISHER, M. M.; MILLER, S. T.; CHAPMAN, A. D.; KEENAN, L. W. Phytoplankton dynamics in a chain of subtropical blackwater lakes: the upper st. johns river, florida, usa. *Lake and Reservoir Management*, v. 25, p. 73 – 86, Março 2009.
- FRAGOSO JR., C. R.; FERREIRA, T. F.; MARQUES, D. M. *Modelagem Ecológica em Ecossistemas Aquáticas*. 1. ed. [S.l.]: São Paulo - Brasil, 2009.
- FRAGOSO JR., C. R.; VAN NES, E. H.; JANSE, J. H.; MARQUES, D. M. Iph-trim3d-plake: A three-dimensional complex dynamic model for subtropical aquatic ecosystems. *Environmental Modelling Software*, v. 24, p. 1347 – 1348, Novembro 2009.
- FRANZ, G. A. S. *Desenvolvimento, aplicação e análise do modelo de qualidade da água e eutrofização do SisBaHiA<sup>®</sup>*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Paraná, 2010.
- HASLER, A. D. Eutrophication of lakes by domestic drainage. *Ecology*, v. 28(4), p. 383 – 395, 1947.
- IKEDA, S.; ADACHI, N. A dynamic water quality model of lake biwa – a simulation study of the lake eutrophication. *Ecological Modelling*, v. 4, p. 151 – 172, 1978.
- IMBODEN, D. M. Phosphorus model of lake eutrophication. *Limnology and Oceanography*, XIX, n. 2, p. 297 – 304, Março 1974.
- JACOBY, J. M.; LYNCH, D. D.; WELCH, E. B.; PERKINS, M. A. Internal phosphorus loading in a shallow eutrophic lake. *Water Research*, v. 16, p. 911 – 919, 1982.
- JANSE, J. H. Wol-model rivm: een eerste steady analyse. *Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu – RIMV*, 1987a.
- JANSE, J. H. Wol-model rivm: dynamische analyse met drie algensoorten en drie trofische niveaus. *Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu – RIMV*, 1987b.
- JANSE, J. H. *Model studies on the eutrophication of shallow lakes and ditches*. Tese (Doutorado) — Wageningen University, 2005.
- JANSE, J. H.; DONK, E. van; GULATI, R. D. Modelling nutrient cycles in relation to food web structure in a biomanipulated shallow lake. *Netherland Journal of Aquatic Ecology*, v. 29, p. 67 – 79, Abril 1995.
- JUNG, G. B. *Avaliação das Correntes de Maré como recurso energético da costa do Brasil*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Outubro 2015.
- KARADŽIĆ, V.; SUBAKOV-SIMIĆ, G.; KRIZMANIĆ, J.; NATIĆ, D. Phytoplankton and eutrophication development in the water supply reservoirs garaši and bukulja (serbia). *Desalination*, v. 255, p. 91 – 96, Maio 2010.

- KOUWENHOVEN, P.; ALDENBERG, T. A first step in modelling plankton growth in the loosdrecht lakes. *Hydrobiological Bulletin*, v. 20, p. 135 – 145, 1986.
- LAWS, E. A.; CHALUP, M. S. A microalgal growth model. *Limnology and Oceanography*, v. 35, p. 597 – 608, 1990.
- LI-KUN, Y.; SEN, P.; XIN-HUA, Z.; LI, X. Development of a two-dimensional eutrophication model in an urban lake (China) and the application of uncertainty analysis. *Ecological Modelling*, v. 345, p. 63 – 74, Fevereiro 2017.
- LINDHOLM, T.; ERIKSSON, J. E.; MERILUOTO, J. A. O. Toxic cyanobacteria and water quality problems – examples from a eutrophic lake on Åland, south west finland. *Water Research*, v. 23, p. 481 – 486, 1989.
- LUND, J. W. Eutrophication. *Nature*, v. 214, p. 557 – 558, Maio 1967.
- MATSUOKA, Y.; GODA, T.; NAITO, M. An eutrophication model of lake kasumigaura. *Ecological Modelling*, v. 31, p. 201 – 219, Maio 1986.
- MINDER, L. Biologisch-chemische untersuchungen im Zürichsee. *Zeitschrift für Hydrologie*, v. 3, p. 1 – 70, Setembro 1926.
- OWENS, M.; WOOD, G. Some aspects of the eutrophication of water. *Water Res.*, v. 2, p. 151 – 159, 1968.
- RAWSON, D. S. Algal indicators of trophic lake types. *Limnology and Oceanography*, v. 1, p. 18 – 25, Janeiro 1956.
- ROSMAN, P. C. C. *Referência Técnica do SisBaHiA®*. 9b. ed. [S.l.], 2016.
- RYTHER, J. H.; DUNSTAN, W. M. Nitrogen, phosphorus, and eutrophication in the coastal marine environment. *Science*, v. 171, p. 1008 – 1013, Março 1971.
- SAGEHASHI, M.; SAKODA, A.; SUZUKI, M. A mathematical model of a shallow and eutrophic lake (the keszthely basin, lake balaton) and simulation of restorative manipulations. *Water Research*, v. 35, p. 1675 – 1686, Maio 2001.
- SALVADOR, B.; BERSANO, J. G. F. Zooplankton variability in the subtropical estuarine system of paranaguá bay, brazil, in 2012 and 2013. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, v. 199, p. 1 – 13, Dezembro 2017.
- SCHELSCKE, C. L.; STOERMER, E. F. Eutrophication, silica depletion, and predicted changes in algal quality in lake michigan. *Science*, v. 173, p. 423 – 424, 1971.
- SHAN, M.; WANG, Y.; SHEN, X. Study on bioremediation of eutrophic lake. *Journal of Environmental Sciences*, v. 21, p. S16 – S18, 2009.
- SPERLING, M. V. *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos*. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Belo Horizonte/MG: Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, 1995.
- STRAŠKRABA, M. *Remediation and Management of Degraded River Basins*. [S.l.]: NATO ASI Series (Environment), 1995. 73 – 156 p.

STREETER, H. W.; PHELPS, E. B. A study of the pollution and natural purification of the ohio river. *Public Health Bulletin*, v. 146, p. 1 – 80, Fevereiro 1925.

TSIRTSIS, G. E. A simulation model for the description of a eutrophic system with emphasis on the microbial processes. *Water Science and Technology*, v. 32, p. 189 – 196, 1995.

VOINOV, A. A.; SVIREZHEV, Y. M. A minimal model of eutrophication in freshwater ecosystems. *Ecological Modelling*, v. 23, p. 277 – 292, Julho 1984.

VOLLENWEIDER, R. A. Materiali e idee per una idrochimica delle acque insubriche. *Mem. Ist. It. Idrobiol.*, v. 19, p. 1 – 73, 1965.

WOLL, T. A.; AMBROSE, R. B.; MARTIN, J. L.; COMER, E. A. *Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) – DRAFT: User's Manual*. 6.0. ed. [S.l.], 2005.

# Anexos

# ANEXO A – Modelo concentrado – Dados de entrada

Tabela A.1 – Características hidráulicas dos lagos em estudo.

	Lagos	Volume (m <sup>3</sup> )	Área (m <sup>2</sup> )	Vazão (m <sup>3</sup> /s)
1	Hollands-Ankeven	1105000	850000	0,0344
2	Bergse Achterplas	820000	410000	0,0916
3	Bergse Voorplas	1200000	600000	0,1465
4	Beulakerwijde	23400000	13000000	1,5046
5	Bothsol, Grote Wije	1060000	530000	0,0791
6	Kaag, Norremeer	7680000	3200000	4,0593
7	Langeraar, Geerplas	532000	280000	0,0143
8	Loosdrecht	20680000	9400000	0,9139
9	Naarden, Grote Meer	2210000	1700000	0,1968
10	Naarden, Wijde Blik	380000	380000	0,0229
11	Reeuwijk, Nieuwenbroek	1872000	1040000	0,0662
12	Nieuwkoop, Noordeinder	4500000	1500000	0,1094
13	Nieuwkoop, Zuideinder	3000000	1000000	0,3171
14	Reeuwijk, Elfhoeven	2180000	1090000	0,2069
15	Westeinderplassen	23856000	8520000	2,0413
16	Zuidlaardermeer	6000000	6000000	3,0208
17	Nannewijd	1000000	1000000	0,0787
18	Blakaart (B)	300000	300000	0,2479
19	Maten 13 (B)	24000	30000	0,0319
20	Visvijer (B)	8000	10000	0,0003
21	Gara, South (IR)	203000	203000	3,2189
22	Maumwee (IR)	540000	270000	0,1713
23	Mullagh (IR)	805000	350000	0,0190
24	Pollaphuca (IR)	134232000	19740000	7,6081
25	Amor (IR)	22230000	7410000	4,1424
26	Luknajno (PL)	11340000	6300000	0,2333
27	Waalboezem	2964000	780000	0,1806
28	Binnenbedijkte Maas	6320000	1580000	0,2670
29	Brielse Meer	27005000	4910000	2,3129
30	Volkerak	228500000	45700000	24,2780
31	Zoommeer	94800000	15800000	19,3110

Tabela A.1 – *Continuação*

	Lagos	Volume (m <sup>3</sup> )	Área (m <sup>2</sup> )	Vazão (m <sup>3</sup> /s)
32	Oude Venen 2	130000	100000	0,1979
33	Veluwemmer	51840000	32400000	10,013
34	Wolderwijd	34200000	18000000	3,4375
35	Nuldernauw	18270000	8700000	4,7326
36	Drontermeer	7020000	5400000	4,3125
37	Braassemermeer	17628000	4520000	3,2906
38	Langeraar, Noordeinde	1425000	750000	0,0295
39	Mooie Nel	5220000	1160000	1,1828
40	Het Hol	300000	300000	0,0222
41	Kortenhoef	2316000	1930000	0,0949
42	Stichts-Ankeveen	1000000	1000000	0,0382
43	Frisian Lakes	7252000	5180000	0,5576
44	Enso (DK)	209000	110000	0,0345
45	Nederson (DK)	224000	140000	0,5185
46	Soby (DK)	2160000	720000	0,0842
47	Hinge (DK)	1092000	910000	0,6319
48	Kvind (DK)	285000	150000	0,2200
49	Lading (DK)	450000	450000	0,0766
50	Silkeborg-Langso (DK)	920000	460000	1,3310
51	Honda (SP)	90000	90000	0,0081
52	Nueva (SP)	405000	270000	0,0056

# Apêndices

# APÊNDICE A – Modelo concentrado – Dados de entrada

Tabela A.1 – Concentrações de entrada das variáveis de estado nos lagos em estudo.

Lagos	$C_7$ (mg/l)	$C_1$ (mg/l)	$C_2$ (mg/l)	$C_8$ (mg/l)	$C_3$ (mg/l)	$C_9$ (mg/m <sup>3</sup> )	$C_{10}$ (mg/l)
Hollands-Ankeven	0,6	0,45	0,18	0,02	0,02	44	4,4
Bergse Achterplas	2,1	1,47	0,63	0,21	0,21	218	21,8
Bergse Voorplas	1,95	1,365	0,585	0,195	0,195	213	21,3
Beulakerwijde	2,55	1,785	0,765	0,255	0,255	99	9,9
Bothsol, Grote Wijde	0,8	0,56	0,24	0,035	0,035	6	0,6
Kaag, Norremeer	2,75	1,925	0,825	0,44	0,44	35	3,5
Langeraar, Geerplas	10,95	7,665	3,285	0,165	0,165	131	13,1
Loosdrecht	0,55	0,385	0,165	0,055	0,055	44	4,4
Naarden, Grote Meer	0,35	0,245	0,105	0,035	0,035	15	1,5
Naarden, Wijde Blik	0,65	0,455	0,1625	0,065	0,065	16	1,6
Reeuwijk, Nieuwenbroek	1,0	0,7	0,3	0,1	0,1	136	13,6
Nieuwkoop, Noordeinder	0,65	0,455	0,195	0,065	0,065	74	7,4
Nieuwkoop, Zuideinder	0,3	0,21	0,09	0,03	0,03	165	16,5
Reeuwijk, Elfhoeven	1,65	1,155	0,495	0,165	0,165	109	10,9
Westeinderplassen	1,9	1,33	0,57	0,31	0,31	52	5,2
Zuidlaardermeer	1,35	0,945	0,405	0,135	0,135	89	8,9
Nanneveld	1,6	1,12	0,48	0,07	0,07	83	8,3
Blakaart (B)	9,75	6,825	2,925	0,13	0,13	28	2,8
Maten 13 (B)	4,15	2,905	1,245	0,05	0,05	10	1,0
Visvijer (B)	1,5	1,05	0,45	0,025	0,025	3	0,3
Gara, South (IR)	0,35	0,245	0,105	0,035	0,035	5	0,5
Maumwee (IR)	0,15	0,105	0,045	0,015	0,015	2	0,2
Mullagh (IR)	0,9	0,63	0,27	0,09	0,09	29	2,9
Pollaphuca (IR)	0,3	0,21	0,09	0,03	0,03	6	0,6
Amor (IR)	0,65	0,455	0,195	0,065	0,065	71	7,1
Luknajno (PL)	0,2	0,14	0,06	0,02	0,02	18	1,8
Waalboezem	3,15	2,205	0,945	0,28	0,28	25	2,5
Binnenbedijkte Maas	4,9	3,43	1,47	0,19	0,19	97	9,7
Brielse Meer	3,05	2,135	0,915	0,21	0,21	34	3,4
Volkerak	4,25	2,975	1,275	0,14	0,14	23	2,3

Tabela A.1 – *Continuação*

Lagos	$C_7$ (mg/l)	$C_1$ (mg/l)	$C_2$ (mg/l)	$C_8$ (mg/l)	$C_3$ (mg/l)	$C_9$ (mg/m <sup>3</sup> )	$C_{10}$ (mg/l)
Zoommeer	2,85	1,995	0,855	0,065	0,065	28	2,8
Oude Venen 2	2,95	2,065	0,885	0,2	0,2	34	3,4
Veluwemmer	2,35	1,645	0,705	0,07	0,07	59	5,9
Wolderwijd	1,75	1,225	0,525	0,04	0,04	84	8,4
Nuldernauw	1,8	1,26	0,54	0,08	0,08	90	9,0
Drontermeer	21,85	15,295	6,555	0,05	0,05	113	11,3
Braassemmermeer	2,6	1,82	0,78	0,295	0,295	44	4,4
Langeraar, Noordeinde	2,2	1,54	0,66	0,385	0,385	185	18,5
Mooie Nel	2,75	1,925	0,825	1,02	1,02	101	10,1
Het Hol	1,6	1,12	0,48	0,07	0,07	14	1,4
Kortenhoef	2,95	2,065	0,885	0,39	0,39	153	15,3
Stichts-Ankeveen	0,7	0,49	0,21	0,015	0,015	15	1,5
Frisian Lakes	3,8	2,66	1,14	0,21	0,21	88	8,8
Enso (DK)	0,6	0,42	0,18	0,001	0,001	11	1,1
Nederson (DK)	0,015	0,0105	0,0045	0,004	0,004	36	3,6
Soby (DK)	0,65	0,455	0,195	0,01	0,01	6	0,6
Hinge (DK)	1,95	1,365	0,585	0,07	0,07	91	9,1
Kvind (DK)	2,25	1,575	0,675	0,045	0,045	28	2,8
Lading (DK)	2,6	1,82	0,78	0,045	0,045	62	6,2
Silkeborg-Langso (DK)	0,65	0,455	0,195	0,035	0,035	38	3,8
Honda (SP)	2,15	1,505	0,645	0,265	0,265	152	15,2
Nueva (SP)	0,55	0,385	0,165	0,035	0,035	35	3,5

# APÊNDICE B – Resultados dos modelos concentrados

Tabela B.1 – Resultado do modelo concentrado baseado nas formulações do SisBaHiA<sup>®</sup> para os lagos em estudo.

Lagos	$C_7$ ( <i>mg/l</i> )	$C_1$ ( <i>mg/l</i> )	$C_2$ ( <i>mg/l</i> )	$C_8$ ( <i>mg/l</i> )	$C_3$ ( <i>mg/l</i> )	$C_9$ ( <i>mg/m</i> <sup>3</sup> )
Hollands-Ankeven	0,0094	0,0065	0,0195	0,0046	0,0019	0,3080
Bergse Achterplas	0,2119	0,0891	0,2259	0,0717	0,0267	11,4012
Bergse Voorplas	0,2177	0,0909	0,2273	0,0731	0,0267	12,1407
Beulakerwijde	0,1017	0,0532	0,1604	0,0349	0,0173	2,0600
Bothsol, Grote Wijde	0,0355	0,0184	0,0575	0,0050	0,0029	0,1277
Kaag, Norremeer	0,8099	0,3814	0,9038	0,2527	0,1760	11,0807
Langeraar, Geerplas	0,1775	0,0927	0,2999	0,0214	0,0114	0,9845
Loosdrecht	0,0204	0,0089	0,0267	0,0113	0,0070	0,4985
Naarden, Grote Meer	0,0140	0,0094	0,0292	0,0054	0,0023	0,2446
Naarden, Wijde Blik	0,0137	0,0112	0,0359	0,0061	0,0021	0,1814
Reeuwijk, Nieuwenbroek	0,0269	0,0137	0,0399	0,0138	0,0069	1,1458
Nieuwkoop, Noordeinder	0,0175	0,0068	0,0197	0,0070	0,0054	0,4828
Nieuwkoop, Zuideinder	0,0806	0,0265	0,0496	0,0252	0,0139	6,1561
Reeuwijk, Elfhoeven	0,1194	0,0550	0,1501	0,0518	0,0230	4,2510
Westeinderplassen	0,1718	0,0627	0,1572	0,0781	0,0396	5,8853
Zuidlaardermeer	0,2382	0,1642	0,3912	0,0955	0,0289	11,7929
Nannewijd	0,0471	0,0369	0,1130	0,0111	0,0036	1,3903
Blakaart (B)	2,1532	1,7109	3,7128	0,0886	0,0356	6,3721
Maten 13 (B)	1,1236	1,0069	1,8369	0,0361	0,0165	2,0635
Visvijer (B)	0,0155	0,0153	0,0512	0,0013	0,0004	0,0163
Gara, South (IR)	0,2978	0,2126	0,1335	0,0345	0,0302	4,1609
Maumwee (IR)	0,0250	0,0133	0,0357	0,0065	0,0042	0,1362
Mullagh (IR)	0,0154	0,0072	0,0229	0,0054	0,0035	0,1604
Pollaphuca (IR)	0,0234	0,0070	0,0206	0,0047	0,0075	0,1148
Amor (IR)	0,1373	0,0503	0,1174	0,0354	0,0206	5,8720
Luknajno (PL)	0,0028	0,0014	0,0046	0,0013	0,0007	0,0740
Waalboezem	0,1995	0,0708	0,2066	0,0429	0,0358	2,1247
Binnenbedijkte Maas	0,2260	0,0789	0,2357	0,0261	0,0217	2,3162
Brielse Meer	0,3424	0,1052	0,2957	0,0659	0,0614	4,0393

Tabela B.1 – *Continuação*

Lagos	$C_7$ (mg/l)	$C_1$ (mg/l)	$C_2$ (mg/l)	$C_8$ (mg/l)	$C_3$ (mg/l)	$C_9$ (mg/m <sup>3</sup> )
Volkerak	0,4824	0,1629	0,4777	0,0394	0,0423	1,5177
Zoommeer	0,6441	0,2078	0,5634	0,0349	0,0330	4,4342
Oude Venen 2	1,2553	0,7739	1,3250	0,1708	0,0729	30,3870
Veluwemmer	0,2268	0,1315	0,3786	0,0337	0,0148	3,1117
Wolderwijd	0,1121	0,0597	0,1773	0,0196	0,0094	2,2430
Nulder nauw	0,3261	0,1464	0,3766	0,0800	0,0283	11,1800
Drontermeer	4,6041	3,1340	7,3897	0,0808	0,0232	18,7018
Braassemmermeer	0,5319	0,1787	0,4660	0,1267	0,0863	12,6513
Langeraar, Noordeinde	0,0337	0,0168	0,0494	0,0225	0,0116	1,0773
Mooie Nel	0,9458	0,2752	0,6546	0,4668	0,3828	38,4190
Het Hol	0,3277	0,2599	0,5821	0,0430	0,0189	2,1165
Kortenhoef	0,0540	0,0372	0,1165	0,0333	0,0123	1,4299
Stichts-Ankeveen	0,0093	0,0077	0,0252	0,0013	0,0005	0,0904
Frisian Lakes	0,1373	0,0868	0,2713	0,0353	0,0145	1,7608
Enso (DK)	0,0550	0,0296	0,0871	0,0022	0,0013	0,3647
Nederson (DK)	0,0459	0,0201	0,0075	0,0195	0,0105	13,3356
Soby (DK)	0,0207	0,0086	0,0272	0,0012	0,0010	0,0540
Hinge (DK)	0,4187	0,2721	0,6370	0,0758	0,0239	13,8209
Kvind (DK)	0,7309	0,4035	0,8716	0,0460	0,0232	6,8308
Lading (DK)	0,1490	0,1206	0,3617	0,0174	0,0061	1,8471
Silkeborg-Langso (DK)	0,3633	0,1868	0,3041	0,0533	0,0249	15,1798
Honda (SP)	0,0754	0,0573	0,1725	0,0469	0,0149	2,9474
Nueva (SP)	0,0042	0,0025	0,0081	0,0014	0,0007	0,0910

Tabela B.2 – Resultado do modelo concentrado baseado nas formulações do PCLake para os lagos em estudo.

Lagos	$C_7$ (mg/l)	$C_1$ (mg/l)	$C_2$ (mg/l)	$C_8$ (mg/l)	$C_3$ (mg/l)	$C_{10}$ (mg/l)
Hollands-Ankeven	0,0118	0,0098	0,0495	0,0022	0,0083	0,0296
Bergse Achterplas	0,1425	0,0905	0,6942	0,0558	0,0089	0,5331
Bergse Voorplas	0,1448	0,0928	0,7362	0,0556	0,0086	0,5672
Beulakerwijde	0,0858	0,0511	0,1885	0,0407	0,0140	0,1334
Bothsol, Grote Wije	0,0323	0,0186	0,0302	0,0062	0,0105	0,0092
Kaag, Norremeer	0,7127	0,3522	0,7757	0,2664	0,0615	0,4294
Langeraar, Geerplas	0,1579	0,0829	0,1521	0,0126	0,0097	0,0752
Loosdrecht	0,0159	0,0114	0,0695	0,0066	0,0095	0,0407
Naarden, Grote Meer	0,0123	0,0121	0,0355	0,0072	0,0094	0,0232
Naarden, Wijde Blik	0,0122	0,0137	0,0229	0,0095	0,0098	0,0151
Reeuwijk, Nieuwenbroek	0,0211	0,0172	0,1299	0,0114	0,0089	0,0963
Nieuwkoop, Noordeinder	0,0140	0,0091	0,0840	0,0053	0,0101	0,0409
Nieuwkoop, Zuideinder	0,0422	0,0342	0,6919	0,0160	0,0076	0,4052
Reeuwijk, Elfhoeven	0,0913	0,0549	0,3112	0,0396	0,0124	0,2278
Westeinderplassen	0,1166	0,0548	0,2174	0,0628	0,0285	0,1198
Zuidlaardermeer	0,1948	0,1571	0,6234	0,0860	0,0081	0,7149
Nannewijd	0,0670	0,0380	0,1923	0,0137	0,0083	0,1389
Blakaart (B)	1,9880	1,3695	0,7591	0,0931	0,0145	0,4102
Maten 13 (B)	1,0445	0,7895	0,3440	0,0400	0,0120	0,1834
Visvijer (B)	0,0141	0,0166	0,0113	0,0024	0,0090	0,0016
Gara, South (IR)	0,2920	0,2066	0,3671	0,0344	0,0255	0,3827
Maumwee (IR)	0,0229	0,0144	0,0300	0,0072	0,0105	0,0123
Mullagh (IR)	0,0137	0,0091	0,0331	0,0060	0,0107	0,0145
Pollaphuca (IR)	0,0212	0,0076	0,0486	0,0044	0,0133	0,0087
Amor (IR)	0,0956	0,0528	0,5388	0,0285	0,0118	0,3186
Luknajno (PL)	0,0023	0,0045	0,0167	0,0013	0,0088	0,0073
Waalboezem	0,1669	0,0641	0,1637	0,0423	0,0334	0,0465
Binnenbedijkte Maas	0,1934	0,0748	0,3167	0,0234	0,0179	0,1186
Brielse Meer	0,2805	0,0961	0,3717	0,0438	0,0370	0,1117
Volkerak	0,4439	0,1537	0,4089	0,0346	0,0300	0,0955
Zoommeer	0,5752	0,1976	0,7376	0,0275	0,0231	0,1973
Oude Venen 2	0,9693	0,7655	0,7655	0,1717	0,0172	0,9088
Veluwemmer	0,2002	0,1195	0,3072	0,0287	0,0092	0,2367
Wolderwijd	0,0963	0,0584	0,2506	0,0132	0,0075	0,1853

Tabela B.2 – *Continuação*

Lagos	$C_7$ (mg/l)	$C_1$ (mg/l)	$C_2$ (mg/l)	$C_8$ (mg/l)	$C_3$ (mg/l)	$C_{10}$ (mg/l)
Nuldernauw	0,2536	0,1427	0,7110	0,0425	0,0092	0,5318
Drontermeer	4,2379	2,5644	2,2192	0,0442	0,0047	1,2184
Braassemermeer	0,4001	0,1641	0,5939	0,1088	0,0377	0,3608
Langeraar, Noordeinde	0,0270	0,0190	0,1140	0,0230	0,0127	0,0784
Mooie Nel	0,6295	0,3022	1,5915	0,4285	0,0423	2,0560
Het Hol	0,3003	0,2136	0,2060	0,0481	0,0138	0,1638
Kortenhoef	0,0459	0,0363	0,1213	0,0418	0,0123	0,1099
Stichts-Ankeveen	0,0083	0,0109	0,0167	0,0016	0,0086	0,0090
Frisian Lakes	0,1209	0,0774	0,1701	0,0395	0,0125	0,1303
Enso (DK)	0,0499	0,0289	0,0684	0,0010	0,0074	0,0358
Nederson (DK)	0,0251	0,0408	1,2051	0,0078	0,0034	1,1143
Soby (DK)	0,0190	0,0097	0,0244	0,0110	0,0090	0,0052
Hinge (DK)	0,3565	0,2522	0,8822	0,0525	0,0060	0,8842
Kvind (DK)	0,6691	0,3677	0,6807	0,0347	0,0103	0,4439
Lading (DK)	0,1332	0,1006	0,1811	0,0173	0,0069	0,1691
Silkeborg-Langso (DK)	0,3107	0,1947	1,1582	0,0336	0,0081	0,9590
Honda (SP)	0,0627	0,0545	0,2067	0,0565	0,0100	0,2221
Nueva (SP)	0,0036	0,0059	0,0179	0,0015	0,0088	0,0090