

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E ENGENHARIA AMBIENTAL

**MODELAGEM BIDIMENSIONAL PARA SIMULAÇÃO
DA QUALIDADE DA ÁGUA DO LAGO PARANOÁ - DF**

LAÍS DE ALMEIDA MARQUES

ORIENTADOR: D. Sc. RICARDO TEZINI MINOTI

CO-ORIENTADOR: Ph.D. SÉRGIO KOIDE

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM TECNOLOGIA AMBIENTAL E RECURSOS
HÍDRICOS**

Brasília/DF: 30 de Junho de 2021

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL

MODELAGEM BIDIMENSIONAL PARA SIMULAÇÃO DA QUALIDADE DA ÁGUA DO LAGO PARANOÁ - DF

LAÍS DE ALMEIDA MARQUES

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL DA FACULDADE DE TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA, COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM TECNOLOGIA AMBIENTAL E RECURSOS HÍDRICOS.

APROVADA POR:

Prof. Ricardo Tezini Minoti, D. Sc.
(Orientador)

Prof. Sérgio Koide, Ph.D.
(Co-orientador)

Prof. Alexandre Kepler Soares, Dr.
(Examinador Interno)

Talita Fernanda das Graças Silva, Dra. (UFMG)
(Examinador Externo)

BRASÍLIA/DF, 30 DE JUNHO DE 2021.

FICHA CATALOGRÁFICA

MARQUES, LAÍS DE ALMEIDA

Modelagem bidimensional para simulação da qualidade da água do Lago Paranoá - DF xvii, 131p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Programa de Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos, 2021). Dissertação de Mestrado - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental.

- | | |
|---------------|-------------------------|
| 1. Modelagem | 2. Qualidade da água |
| 3. CE-QUAL-W2 | 4. Rotina de Calibração |
| I. ENC/FT/UnB | II. Título (série) |

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

Marques, L. A. (2021). Modelagem bidimensional para simulação da qualidade da água do Lago Paranoá - DF. Dissertação de Mestrado em Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos, Publicação PTARH.DM - 240/2021, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 131p.

CESSÃO DE DIREITOS

AUTOR: Laís de Almeida Marques.

TÍTULO: Modelagem bidimensional para simulação da qualidade da água do Lago Paranoá - DF.

GRAU / ANO: Mestre / 2021

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Laís de Almeida Marques
amarques.lais@gmail.com

À esperança de dias melhores

AGRADECIMENTOS

Fazer pós-graduação no Brasil hoje requer alguns privilégios, e tive a sorte de tê-los: agradeço aos Almeida e aos Marques, principalmente a meus pais Givanildo e Sandra, pelo apoio emocional, financeiro, e amor incondicional. Aos Gomes e Coelho, principalmente a minha tia Edna e Letícia, por terem me acolhido em sua casa aqui em Brasília como filha quando precisei e nunca terem me negado nada. A Matheus, por todo o carinho, amor, e apoio enquanto eu fazia essa dissertação. A Nicole, Eliane e Waldir, pelo sentimento sincero e recíproco.

Aos amigos, aos novos e aos velhos, espalhados por todos os lugares: talvez tenha aprendido mais nos últimos anos que na minha vida inteira. Obrigada por tanto. Nominalmente gostaria de agradecer a Arthur, Ana Alice, Guilherme, Laís, Laura, Letícia e demais alunos da turma de 2018 com quem dividi boas lembranças. Aos amigos de Maceió, de Porto Alegre, Rio de Janeiro, São Paulo, e de tantos outros lugares, obrigada por terem me ajudado a manter a sanidade e me ajudado a conhecer e construir quem sou.

Talvez nunca tenhamos vivido tempos tão sombrios para a ciência no Brasil. Por isso, quero agradecer a meu orientador, Ricardo Minoti, ao meu co-orientador, Sérgio Koide, e demais professores do Programa de Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos da Universidade de Brasília, em especial à professora Yovanka Perez, por quem tenho um grande carinho, por todo o conhecimento e paciência neste processo, assim como parabenizá-los por continuarem resistindo aos ataques que a educação pública e a ciência no Brasil vêm sofrendo de forma tão escancarada.

Este trabalho também não teria sido possível sem o auxílio de Gilliard Nunes e Ramon Barros. Obrigada pela paciência, amizade, por toda ajuda e dedicação.

Obrigada a Caesb por ceder os dados para a realização do trabalho, à FAPDF pelo auxílio financeiro para divulgação de parte deste trabalho em congresso internacional, e ao CNPq pela bolsa para realização do mestrado.

Fazer pós-graduação no Brasil requer alguns privilégios, e eu tive muitos. Espero que um

dia tudo isso seja apenas uma questão de escolha, acessível a todos os brasileiros, a quem também agradeço, por financiarem a educação pública, gratuita e de qualidade no país.

RESUMO

O Lago Paranoá foi criado em 1959 com múltiplos usos, atingindo objetivos paisagísticos, recreativos, de geração de energia elétrica e diluição de efluentes. Em 2017, esse lago passou a ser utilizado também como manancial de abastecimento humano, apesar de estudos apontarem a presença de cianobactérias nesse corpo hídrico. O modelo bidimensional CE-QUAL-W2 foi utilizado neste trabalho com o objetivo de avaliar seu potencial para a simulação da qualidade da água do Lago Paranoá, com o auxílio de uma rotina computacional com finalidade de calibração desenvolvido em linguagem Python, utilizando a técnica de otimização SCE-UA. Foi realizada uma análise de sensibilidade para identificação de principais parâmetros a serem calibrados, junto com um levantamento bibliográfico para determinar o intervalo de variação das variáveis de decisão e estimativa inicial, que foram então inseridos no algoritmo. Dentre os constituintes de qualidade da água simulados, analisamos especificamente a simulação de Oxigênio Dissolvido (OD), Amônia, Fósforo Total e Fitoplâncton. O modelo apresentou melhor performance na simulação do OD, com RMSE de 1,00 mg/L na camada de 10m, sendo capaz de representar os períodos de mistura completa do lago que, sendo monomítico, ocorrem uma vez ao ano. No entanto, no período de estratificação, houve uma discrepância significativa na simulação de OD nas camadas de fundo, o que foi determinante na simulação das demais variáveis. O módulo hidrodinâmico foi afetado de forma significativa após a simulação do módulo de qualidade, simulando temperatura praticamente constante em toda a coluna d'água, sendo recomendado assim que a calibração dos dois módulos do modelo seja feita de forma concomitante, se possível usando computadores de alta performance. A rotina computacional utilizada se mostrou como uma adequada ferramenta para auxílio neste processo, apesar de modificações serem ainda necessárias para aprimorar a simulação da qualidade da água.

Palavras-Chave: modelagem, qualidade da água, CE-QUAL-W2, rotina de calibração

ABSTRACT

The Paranoá Lake was created in 1959 with multiple uses, achieving aesthetic purposes, recreational, electric power production and the receptor of wastewater treatment plants. In 2017, this lake has also become a source for water supply, despite studies showing the presence of cyanobacteria in this waterbody. The bidimensional model CE-QUAL-W2 was used in this work with the objective of evaluating its potential to simulate Paranoá Lake's water quality, with the help of an algorithm developed in Python language to calibrate the model, using the SCE-UA optimization technique. A sensitivity analysis was made to identify the main parameters to be calibrated, as well as a literature review to determine the range of each parameter's values and optimum values, that were then inserted in the algorithm. Among the water quality constituents simulated, we analyze specifically Dissolved Oxygen, Ammonium, Total Phosphorus and Phytoplankton. The model showed a better performance in OD simulation, with an RMSE of 1,00mg/L in the 10m depth, being able to reproduce the periods of complete mixing in the lake, that being monomitic, happens once a year. Nonetheless, in stratification period, there was a significative discrepancy in OD simulation in the bottom layers, which had a major effect in the simulation of the other variables. The hydrodynamic module was severely affected after water quality simulation, simulating the temperature approximatly constant throughout water column, and therefore we recommend that both modules are calibrated at the same time, using high performance computers if possible. The algorithm has proven to be an adequate tool to auxiliante this process, although modifications are still necessary to improve water quality simulation.

Key-Words: *modelling, water quality, CE-QUAL-W2, calibration routine*

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
2. OBJETIVOS	4
2.1 OBJETIVO GERAL	4
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	4
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
3.1 ASPECTOS GERAIS DE LIMNOLOGIA	5
3.2 QUALIDADE DE ÁGUA EM LAGOS	10
3.2.1 Oxigênio Dissolvido	11
3.2.2 Matéria Orgânica	14
3.2.3 Nutrientes e eutrofização	16
3.2.4 Comunidade fitoplanctônica e produção primária	21
3.3 MODELOS ECOLÓGICOS	24
3.3.1 CE-QUAL-W2	27
3.3.2 Levantamento bibliográfico de parâmetros	35
3.3.3 Histórico e aplicações do modelo	36
3.4 O LAGO PARANOÁ	42
4. METODOLOGIA	46
4.1 DEFINIÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO	46
4.2 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO	48
4.3 CARACTERIZAÇÃO DA BASE DE DADOS	54
4.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	56
4.5 PREPARAÇÃO DE ARQUIVOS DE ENTRADA E CONDIÇÕES INICIAIS	58
4.5.1 Geometria da área de estudo e características do corpo d'água	59
4.5.2 Estruturas Hidráulicas	59

4.5.3	Dados meteorológicos	60
4.5.4	Condições iniciais	61
4.5.5	Coefficientes hidráulicos	62
4.5.6	Condições de contorno	62
4.6	CONFIGURAÇÃO DO ALGORITMO E CENÁRIOS DE CALIBRAÇÃO	65
4.6.1	Métricas para avaliação da simulação	68
5.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	70
5.1	OXIGÊNIO DISSOLVIDO	70
5.2	FÓSFORO TOTAL E NITROGÊNIO AMONÍACAL	75
5.3	FITOPLÂNCTON	82
5.4	AVALIAÇÃO DA ROTINA COMPUTACIONAL DE CALIBRAÇÃO	87
6.	CONCLUSÃO	91
6.1	RECOMENDAÇÕES	93
	Apêndice A. Equações do modelo	105
	Apêndice B. Perfis de temperatura após primeira calibração hidrodinâmica	111
	Apêndice C. Séries temporais das condições de contorno de qualidade	113
	Apêndice D. Código das principais funções da rotina computacional utilizada	122
	Apêndice E. Perfis de concentração de OD	126
	Apêndice F. Resultados da segunda calibração do módulo de qualidade da água	129

LISTA DE FIGURAS

3.1	Diagrama dos fatores que influenciam no ecossistema (Rawson, 1939 <i>apud</i> Tundisi e Tundisi, 2008)	6
3.2	Estratificação térmica em lagos, adaptado de Braga (2007).	7
3.3	Distribuições verticais de oxigênio dissolvido em lagos (Cole, 1983 <i>apud</i> Tundisi e Tundisi, 2008)	14
3.4	Diagrama representativo da fotoinibição.	22
3.5	Fluxo de Oxigênio Dissolvido no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	30
3.6	Fluxo de Matéria Orgânica Dissolvida Lábil no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	31
3.7	Fluxo de Matéria Orgânica Dissolvida Refratária no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	31
3.8	Fluxo de Matéria Orgânica Particulada Lábil no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	32
3.9	Fluxo de Matéria Orgânica Particulada Refratária no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	32
3.10	Fluxo de Amônia no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	33
3.11	Fluxo de Nitrato-Nitrito no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	33
3.12	Fluxo de Fosfato no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	34
3.13	Fluxo interno entre compartimento de sedimento com reações de ordem-0 e outros compartimentos (adaptado de Cole, 2019).	34
3.14	Fluxo interno entre compartimento de sedimento com reações de ordem-1 e outros compartimentos (adaptado de Cole, 2019).	35
3.15	Fluxo de Fitoplâncton no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).	36
3.16	Localização da bacia hidrográfica do Paranoá dentro do Distrito Federal, e do Lago Paranoá na bacia, assim como a identificação dos braços pelos nomes dos rios afluentes (adaptado de Araújo e Souto (2013)).	42

4.1	Fluxograma com o resumo das etapas deste trabalho.	47
4.2	Bacias Hidrográficas do Distrito Federal (Adasa, 2020).	49
4.3	Batimetria do lago Paranoá com curvas de nível de 1 em 1 metro a partir da borda com cota 1000m (Pires and Ianniruberto, 2008).	51
4.4	Extensão dos dados disponíveis de qualidade de água do ponto C (estação central da CAESB) do lago Paranoá/DF, na profundidade de 1m.	55
4.5	Simulação de Fitoplâncton com variação dos parâmetros de crescimento (AG), respiração (AR), mortalidade (AM) e sedimentação (AS), assumindo os extremos do intervalo sugerido pelo modelo.	57
4.6	Simulação de Fitoplâncton com variação dos parâmetros de excreção (AE), constante de meia saturação por nitrogênio (AHSN), constante de meia satu- ração por fósforo (AHSP) e saturação por luz (ASAT), assumindo os extre- mos do intervalo sugerido pelo modelo.	57
4.7	Simulação de Fósforo Total, Amônia e Nitrito-Nitrato com variação dos pa- râmetros da taxa de liberação de ortofosfato pelo sedimento (PO4R), se- dimentação de matéria orgânica (POMS), taxa de decaimento da amônia (NH4DK) , taxa de liberação da amônia pelo sedimento (NH4R), e taxa de decaimento do nitrato (NH4DK), assumindo os extremos do intervalo sugere- rido pelo modelo.	58
4.8	Discretização do lago nos 5 corpos d'água para inserção no modelo.	60
4.9	Discretização longitudinal e vertical de cada corpo d'água.	61
4.10	Perfil de temperatura simulado (linha vermelha) e dados observados (linha azul) para o ano de 2008 (Nunes, 2018).	63
4.11	Postos utilizados para construção dos arquivos de condições de contorno do modelo.	66
5.1	Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2008.	71

5.2	Somatório dos fluxos de Oxigênio Dissolvido em todo o período simulado (2006-2010) para as profundidades a) 1m, b) 10m, c)15m, d) 20m, e)29m. As barras azuis correspondem ao segundo eixo y, utilizado pela diferença em ordem de grandeza dos fluxos.	73
5.3	Série temporal de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d)20m, e)29m (1m do fundo).	74
5.4	Série temporal do Fósforo Total simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d)20m, e)29m (1m do fundo).	76
5.5	Série temporal do Nitrogênio Total simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d)20m, e)29m (1m do fundo).	77
5.6	Série temporal para o ano de 2008 a 29m de profundidade para a)NH ₄ , b) TP e c)OD.	78
5.7	Somatório dos fluxos de PO ₄ em todo o período simulado (2006-2010) para as profundidades a) 1m, b) 10m, c)15m, d) 20m, e)29m.	79
5.8	Somatório dos fluxos de NH ₄ em todo o período simulado (2006-2010) para as profundidades a) 1m, b) 10m, c)15m, d) 20m, e)29m.	80
5.9	Série temporal para todo o período simulado a 15m de profundidade em menor intervalo do eixo Y.	81
5.10	Série temporal do Fitoplâncton simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d) 20m, e) 29m (1m do fundo).	83
5.11	Perfil de temperaturas (termoclina) após a calibração do módulo de qualidade e dados observados para o ano de 2008).	84
5.12	Perfil de temperaturas (termoclina) simulado após a calibração hidrodinâmica com novo conjunto de valores e dados observados de 2008).	85

5.13	Série temporal de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d) 20m, e) 29m (1m do fundo).	86
5.14	Série temporal de Fitoplâncton simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d) 20m, e) 29m (1m do fundo).	87
5.15	Valores de Nash-Sutcliffe para as 5 profundidades em três diferentes cenários: i) modelo com valores <i>default</i> (linha de base); ii) modelo com valores médios encontrados na literatura; iii) modelo após a calibração com o algoritmo utilizando a técnica de otimização SCE-UA.	89
B.1	Perfis de temperatura simulada (linha vermelha) e observada (linha azul) para o ano de 2007.	111
B.2	Perfis de temperatura simulada (linha vermelha) e observada (linha azul) para o ano de 2009.	111
B.3	Perfis de temperatura simulada (linha vermelha) e observada (linha azul) para o ano de 2010.	112
C.1	Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Bananal.	113
C.2	Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Gama.	114
C.3	Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Riacho Fundo.	115
C.4	Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Torto.	116
C.5	Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Bananal.	117

C.6	Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Gama.	118
C.7	Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Riacho Fundo. . .	119
C.8	Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD no corpo hídrico Torto.	120
C.9	Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ da ETE Norte.	120
C.10	Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ da ETE Sul.	121
C.11	Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO ₄ , NH ₄ , NO ₂ -NO ₃ e OD do tributário Córrego Cabeça de Veado	121
E.1	Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2007.	126
E.2	Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2009.	127
E.3	Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2010.	128
F.1	Série temporal de NH ₄ simulado (linha vermelha) e observado (pontos azuis) para as 5 profundidades.	130
F.2	Série temporal de Fósforo Total simulado (linha vermelha) e observado (pontos azuis) para as 5 profundidades.	131

LISTA DE TABELAS

3.1	Principais diferenças entre lagos e represas, adaptado de Tundisi e Tundisi (2008).	10
3.2	Levantamento de estudos contendo os parâmetros do modelo CE-QUAL-W2 usualmente calibrados no módulo de nutrientes e fitoplâncton.	37
3.3	Levantamento de estudos contendo os parâmetros do modelo CE-QUAL-W2 usualmente calibrados no módulo referente ao fitoplâncton.	38
3.4	Parâmetros calibrados com maior frequência no módulo de nutrientes, seus valores médios, mínimos, máximos e desvio padrão.	38
3.5	Parâmetros calibrados com maior frequência no módulo de fitoplâncton, seus valores médios, mínimos, máximos e desvio padrão.	39
4.1	Localização das estações existentes de monitoramento dos sistemas fluviais na bacia do rio Paranoá/DF.	52
4.2	Parâmetros <i>default</i> e calibrados do módulo hidrodinâmico por Nunes (2018).	63
4.3	Variáveis calibradas no cenário I, assim como seus intervalos de calibração e estimativa inicial.	67
5.1	Parâmetros calibrados em cada cenário, valores <i>default</i> e valores encontrados após a calibração, assim como os NSE de cada cenário.	71
5.2	Valores das métricas de avaliação da simulação em cada camada para oxigênio dissolvido.	75
5.3	Valores das métricas de avaliação da simulação em cada camada para fósforo total.	82
5.4	Métricas para avaliação da simulação em cada camada para nitrogênio amoniacal.	82
5.5	Valores das métricas de avaliação da simulação em cada camada para Fitoplâncton.	84

5.6	Novo conjunto de parâmetros calibrados para o módulo hidrodinâmico.	85
F.1	Parâmetros encontrados na segunda simulação do módulo de qualidade de água, com novo conjunto de parâmetros hidrodinâmicos.	129

1 INTRODUÇÃO

Estima-se que um dos maiores problemas do século 21 será a disponibilidade de água para abastecimento humano devido ao aumento populacional e desenvolvimento econômico. No Brasil, municípios em diferentes regiões têm enfrentado cenários complexos de escassez hídrica devido às chuvas abaixo da média, como a cidade de São Paulo em meados de 2015, e mais recentemente, o Distrito Federal nos anos de 2016 e 2017. Além da baixa pluviosidade, possíveis conflitos gerados pelos múltiplos usos dos recursos hídricos demandam um planejamento estratégico adequado por parte dos órgãos gestores.

Ainda, além dos aspectos quantitativos que levam a cenários de escassez hídrica, os recursos hídricos são ameaçados constantemente pela eutrofização, acidificação e contaminação por substâncias tóxicas (Ansari, 2010; Jacobi et al., 2015). Para caracterizar qualitativamente um corpo hídrico, variáveis físicas, químicas e biológicas inerentes a esses corpos d'água precisam ser analisadas, assim como características do uso e ocupação do solo na bacia hidrográfica em que se encontra.

Nesse sentido, a eutrofização é um fenômeno de interesse em lagos, podendo ser definida como uma resposta do ecossistema ao aumento na concentração de nutrientes no corpo d'água, podendo ser tanto de fontes naturais como antrópicas. O aumento de concentração nos nutrientes eleva a taxa de produção primária, realizada pelo fitoplâncton (algas uni e pluricelulares) e macrófitas aquáticas, e pode levar a uma série de consequências negativas ao meio, tais como: a ausência de oxigênio nas regiões mais profundas da coluna d'água (anoxia), provocando mortalidade em massa de peixes e invertebrados bentônicos, acentuada queda na biodiversidade e no número de espécies de plantas e animais, com dominância de poucas espécies que se beneficiam do processo (Tundisi and Tundisi, 2008).

Conforme mencionado anteriormente, a cidade de Brasília (DF) passou, em 2016, por situações críticas de escassez hídrica nos principais reservatórios de abastecimento da cidade (Descoberto e Santa Maria) (Adasa, 2016), o que levou, a partir do segundo semestre de 2017, ao uso do lago Paranoá para abastecimento humano, lago que já contava com múltiplos

usos desde sua criação, tais como geração de energia elétrica, harmonização paisagística, recreação e diluição de efluentes sanitários.

Esse lago apresentou níveis elevados de eutrofização até a década de 1990, com constantes florações de cianobactérias. Por essas razões, o monitoramento limnológico, realizado pela Companhia de Saneamento Ambiental do Distrito Federal (Caesb), foi iniciado na década de 1970. Foram realizadas ainda numerosas intervenções, como por exemplo, o uso de algicidas para a contenção dos florescimentos, ampliação e modificações no processo de tratamento das Estações de Tratamento de Esgotos (ETE Norte e Sul) que têm o lago como corpo receptor (Burnett et al., 2001).

A morfologia do lago Paranoá e as características de suas bacias de drenagem levam a diferenças nos aspectos qualitativos dos braços afluentes e corpo central. Essas diferenças espaciais, tanto horizontal como verticalmente, além da ocorrência de mistura completa no lago uma vez ao longo do ano (na época fria), acrescentam ainda mais complexidade ao sistema.

Nos últimos anos, tem se tornado expressivo o uso de modelos ecológicos para simulação de cenários e tentativas de previsão da qualidade da água de corpos hídricos (Glibert et al., 2010; Hipsey et al., 2015; Bhagowati and Ahamad, 2019). Esses modelos precisam ser capazes de capturar a complexidade desses sistemas em resposta a múltiplos fatores externos.

O modelo CE-QUAL-W2 é um modelo bidimensional amplamente difundido na modelagem da qualidade de água em rios, lagos e reservatórios (Afshar and Saadatpour, 2009; Noori et al., 2015; Brito et al., 2018; Ha and Lee, 2008). Compreende um módulo hidrodinâmico e um módulo de qualidade da água, apresentando resultados satisfatórios para ambientes lênticos com segmentos alongados e com estruturas hidráulicas.

Seu processo de calibração, no entanto, pode ser dispendioso, por exigir uma quantidade considerável de parâmetros a depender das variáveis a serem simuladas. Por isso, pesquisadores têm feito uso de técnicas de otimização para auxiliar neste processo. Uma dessas técnicas é o SCE-UA, o *Shuffled Complex Evolution Method*, desenvolvido na University of Arizona (Duan et al., 1992), que se baseia nos princípios de combinação de população,

evolução sistemática e competitiva.

Em continuação a trabalhos já realizados no Programa de Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos da Universidade de Brasília (PTARH/UnB) (Liporoni, 2012; Barros, 2018; Nunes, 2018), que já obtiveram resultados satisfatórios na calibração e simulação do módulo hidrodinâmico do CE-QUAL-W2, assim como do uso de rotina computacional desenvolvido em linguagem Python com para calibração utilizando a técnica de otimização SCE-UA, o objetivo deste trabalho é calibrar o módulo de qualidade da água desse modelo ao Lago Paranoá.

Uma vez obtida uma calibração satisfatória para as diferentes variáveis de qualidade, será possível utilizar este programa para simulação de cenários, de modo que possa ser utilizado como ferramenta para a gestão desse corpo hídrico pelos órgãos competentes.

O trabalho está dividido nos seguintes capítulos: (2) objetivos geral e específicos; (3) fundamentação teórica e revisão bibliográfica, abordando aspectos gerais de limnologia, da qualidade de água em lagos, e do modelo utilizado; (4) a metodologia utilizada no estudo, incluindo caracterização da área de estudo, da base de dados, levantamento bibliográfico de parâmetros e a configuração do modelo e do algoritmo de calibração; (5) apresentação e discussão dos resultados obtidos; e (6) principais conclusões do trabalho, incluindo recomendações para trabalhos futuros.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Calibrar o módulo de qualidade da água do modelo CE-QUAL-W2 em relação às variáveis Oxigênio Dissolvido, Fósforo Total, Nitrogênio Amoniacoal e comunidade fitoplanctônica para uma adequada simulação dos principais processos qualitativos e biológicos do Lago Paranoá, localizado em Brasília, DF.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar parâmetros de relevância para a calibração do Oxigênio Dissolvido, Fósforo Total, Nitrogênio Amoniacoal e Fitoplâncton, assim como seus intervalos comumente encontrados em levantamento bibliográfico e análise de sensibilidade.
- Calibrar o modelo CE-QUAL-W2 com auxílio de um rotina computacional desenvolvido em linguagem Python utilizando a técnica de otimização SCE-UA.
- Compreender os fluxos e processos internos do lago que caracterizam seus aspectos qualitativos. Assim como os fluxos e processos inerentes ao modelo, identificando variáveis de maior relevância e dados necessários para uma simulação adequada.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, é feita uma fundamentação dos principais conceitos utilizados neste trabalho, assim com uma breve revisão do estado da arte na literatura em relação a modelagem de lagos utilizando o CE-QUAL-W2. Primeiramente, são apresentados **aspectos gerais limnológicos** e pontos importantes na concepção de **qualidade de água em lagos**, sendo eles: a *dinâmica do oxigênio dissolvido, matéria orgânica, nutrientes e eutrofização*, onde são discutidos mais a fundo o *nitrogênio e fósforo*, assim como uma revisão geral sobre a *comunidade fitoplânctonica* e sua dinâmica.

Ainda, é feita uma breve revisão sobre **modelos ecológicos**, com principal atenção ao modelo *CE-QUAL-W2*, utilizado neste trabalho, assim como um breve *histórico do modelo e suas aplicações*, e por fim, são descritas as características gerais e histórico do **Lago Paranoá**.

3.1 ASPECTOS GERAIS DE LIMNOLOGIA

Lagos são corpos d'água interiores sem comunicação direta com o mar, distribuídos sobre a superfície terrestre onde quer que as condições climáticas e geológicas permitam o acúmulo de água parada. Os reservatórios, por sua vez, são lagos construídos, muitas vezes para suplementar os lagos naturais, e junto com esses, formam o ecossistema lacustre (Esteves, 2011; Taub, 1984). Esse ecossistema apresenta uma forte interação com a bacia hidrográfica afluente, incluindo as áreas de drenagem direta, recebendo assim a influência das atividades humanas que nela se desenvolvem, por serem fonte de água, sedimentos e materiais alóctones (fonte externa) ao lago (Tundisi and Tundisi, 2008; Taub, 1984).

A grande importância desses sistemas está associada à qualidade da água, por terem a capacidade de reter sedimentos, matéria orgânica, excesso de nutrientes, entre outros; além de servir como recurso biológico local (berçário de peixes, por exemplo), e no caso de reservatórios construídos, exercer seus usos pré-designados, como por exemplo recreação, navegação, geração de energia elétrica (Tundisi and Tundisi, 2008).

É difícil tentar caracterizar “lagos típicos” devido à grande variabilidade entre lagos do mundo todo, pois aspectos regionais, como temperatura e presença de gelo, por exemplo, determinam muitas das características físicas, químicas e biológicas desses ambientes. Mesmo dentro de um único lago, pode-se encontrar variações sazonais e de ano para ano, como mudanças nas espécies planctônicas dominantes (Taub, 1984). Na Figura 3.1, está diagramado o complexo sistema de interações que se desenvolve no ecossistema aquático, adaptado por Tundisi e Tundisi (2008) do trabalho de Rawson (1939).

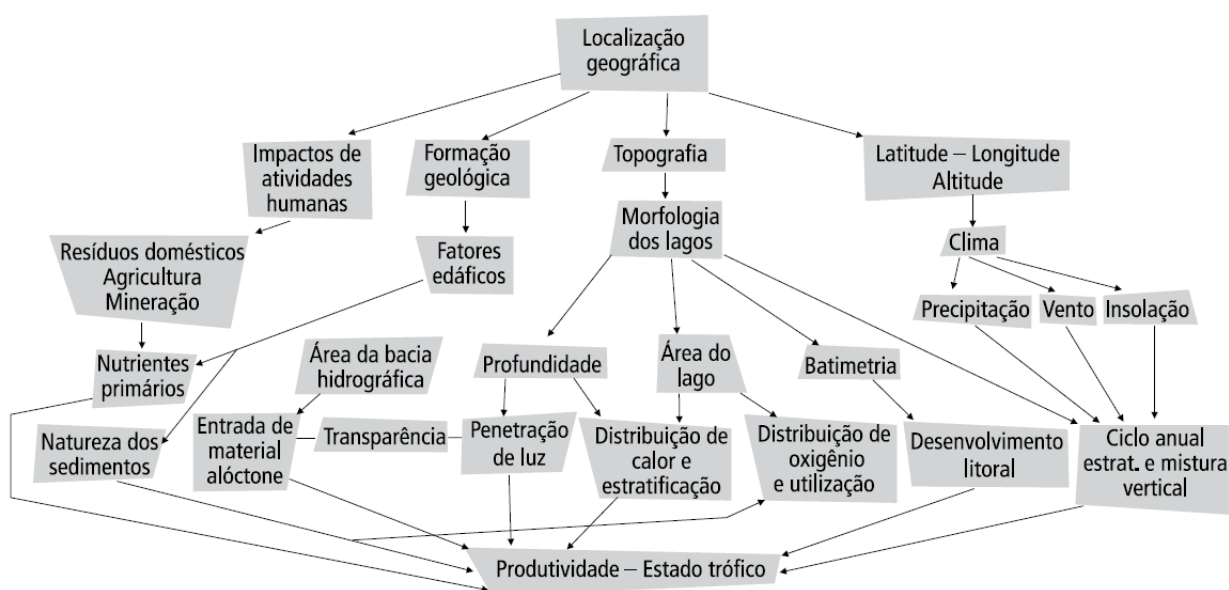


Figura 3.1: Diagrama dos fatores que influenciam no ecossistema (Rawson, 1939 *apud* Tundisi e Tundisi, 2008)

No entanto, algumas características gerais desses ecossistemas estão associadas a processos físicos por mecanismos externos e internos, sua zonação (regiões ou compartimentos), suas comunidades biológicas, entre outros.

Alguns mecanismos externos que atuam na estrutura vertical e horizontal de lagos são o vento, a pressão barométrica e transferência de calor. Internamente, pode-se citar, a estratificação, a mistura vertical e correntes de densidade. A estratificação pode ser definida como a formação de camadas horizontais de água com diferentes densidades com um grau mínimo de mistura entre elas. A mais comum e de extrema importância na dinâmica de lagos é a es-

tratificação térmica, que determina as características básicas de seu funcionamento (Tundisi and Tundisi, 2008).

Se a estratificação ocorrer, especialmente em lagos profundos, há a formação de três camadas distintas: o epilímnio, metalímnio e o hipolímnio. O epilímnio, uma camada mais aquecida, menos densa e de circulação relativamente livre, é bastante homogêneo devido à ação do vento e o aquecimento térmico diurno e subsequente resfriamento noturno (O'Sullivan and Reynolds, 2005; Tundisi and Tundisi, 2008).

Esta camada sobrepõe uma camada com temperaturas mais baixas, o hipolímnio, e entre essas duas camadas encontra-se o metalímnio (ou mesolímnio), onde a termoclina tem a maior variação (O'Sullivan and Reynolds, 2005). Estas regiões estão demonstradas na Figura 3.2.

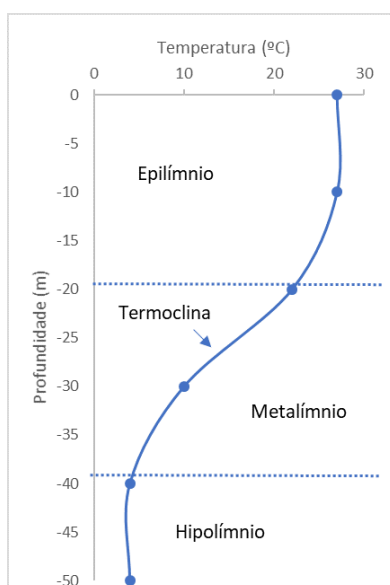


Figura 3.2: Estratificação térmica em lagos, adaptado de Braga (2007).

Em alguns períodos do ano, pode acontecer a desestratificação do lago, quando as temperaturas da superfície e do fundo do lago são aproximadamente as mesmas, configurando uma situação instável. Nesses casos, há pouca resistência à mistura, e até mesmo uma pequena energia do vento é suficiente para provocar uma mistura completa na coluna d'água (Wetzel, 2001).

Em reservatórios, alguns processos adicionais podem ocorrer, como a estratificação hi-

dráulica, ocasionada pela saída de água a diferentes profundidades, produzindo uma estratificação térmica bastante acentuada. Outros processos comuns são a estratificação térmica devido à advecção causada pela entrada de rios ou fontes com temperatura mais baixa, ou pela altura de saída de águas do vertedouro.

De acordo com Tundisi e Tundisi (2008), em relação ao seu padrão térmico, os lagos podem ser classificados em:

- Lagos monomíticos: lagos que apresentam um período regular de circulação total que ocorre em alguma época do ano, podendo ser quentes quando a mistura completa ocorre durante o inverno, e frios quando ocorre durante a primavera e verão. O processo de estratificação naqueles ocorre devido ao aquecimento térmico da superfície.
- Lagos dimíticos: lagos que apresentam dois períodos anuais de circulação. Permanece estratificado durante o verão até o outono, quando ocorre a mistura completa, e segue um período de resfriamento térmico e o estabelecimento de uma termoclina inversa com cobertura de gelo na superfície. Na primavera, acontece uma nova mistura completa por causa do desaparecimento da camada de gelo (normalmente acontecem em regiões com elevada altitude nos trópicos).
- Lagos polimíticos: lagos onde a mistura completa ocorre várias vezes ao longo do ano. Apresentam variações diurnas de temperatura e formação de termoclinas durante o período diurno, que podem ser mais importantes que as variações estacionais. Mais comuns em lagos rasos sujeitos à ação do vento permanentemente.
- Lagos meromíticos: lagos que nunca apresentam mistura completa e têm uma camada permanentemente sem circulação, denominada monimolímnia. Apresentam grande concentração de substâncias dissolvidas na camada inferior, podendo ocorrer anoxia do fundo. Nesses ambientes, o principal fator para a estratificação é a densidade.
- Tipos menos frequentes: lagos amíticos (apresenta gelo permanente na superfície e ocorre em regiões elevadas), holomíticos (apresentam circulação completa e não têm estratificação ocasional).

Em relação à zonação de lagos, esses podem ser divididos em região (ou zona) litorânea, região limnética ou pelágica, região profunda e interface água-ar. Vale notar que estas regiões não estão isoladas dentro do sistema aquático, mas em constante interação (Esteves, 2011).

A zona litoral de um lago compreende a região desde a margem até a profundidade em que as águas não estratificadas atingem o fundo do lago quando este se encontra estratificado, e apresenta todos os níveis tróficos de um ecossistema (os produtores primários, consumidores e decompositores), sendo considerado um compartimento autônomo dentro do ecossistema aquático (Tundisi and Tundisi, 2008; Esteves, 2011).

A região limnética é onde se encontram os organismos plânctônicos e nectônicos. Os primeiros são constituídos por bactérias, fitoplâncton (algas e cianobactérias uni e pluricelulares) e invertebrados (zooplâncton) que se caracterizam pela capacidade de flutuar na água. O segundo, por sua vez, se caracteriza por possuir movimentos próprios e são formados, em sua maioria, por peixes.

Já na região profunda, geralmente não iluminada e por isso, caracterizada pela ausência de organismos fotoautotróficos, é totalmente dependente da produção de matéria orgânica nas duas regiões anteriores, e onde se encontra a comunidade bentônica, formada principalmente por invertebrados aquáticos.

Por fim, a interface água-ar é formada pelo nêuston e pelo plêuston. Os primeiros são formados por diversos organismos, como bactérias, fungos, algas e cianobactérias, enquanto o plêuston é formado por plantas superiores e animais como aguapé e algumas larvas (Esteves, 2011).

Uma outra abordagem para se determinar as zonas de lagos é a zonação em penetração de luz. Nesse sentido, esses ecossistemas são divididos em duas zonas, a *eufótica* e a *afótica*, onde a primeira corresponde à região iluminada do lago, ou até a profundidade em que ocorre 1% da luz que chega à superfície, e a zona afótica, a região não iluminada. É possível, principalmente em lagos rasos e transparentes, que a zona eufótica estenda-se até o fundo do lago (Tundisi and Tundisi, 2008).

Em lagos construídos, ou represas artificiais, algumas características são diferentes dos

lagos naturais. A Tabela 3.1, adaptada de Tundisi e Tundisi (2008) resume algumas dessas diferenças. Vale salientar que algumas dessas características dependem de cada lago, havendo lagos com tempo de retenção alto ou baixo, por exemplo. No entanto, as propriedades da tabela referem-se às características comumente encontradas.

Tabela 3.1: Principais diferenças entre lagos e represas, adaptado de Tundisi e Tundisi (2008).

Características	Lagos	Represas
Natureza	Naturais	Artificiais
Idade geológica	Pleistoceno ou anterior	Jovens (<100 anos)
Envelhecimento	Lento	Rápido
Formação	Várias origens	Geralmente, inundação de vales
Morfometria	Geralmente regular, oval, redondo	Geralmente dendríticos
Profundidade máxima	Geralmente próxima ao centro	Geralmente próxima à barragem
Sedimentos	Geralmente fontes internas	Geralmente fontes externas
Gradientes longitudinais	Direcionados pelo vento	Direcionados pelo fluxo e pelo vento
Tempo de retenção	Alto	Baixo e variável

Características como o fluxo hidrodinâmico e o tempo de retenção (tempo que o lago renova suas águas), influenciam fortemente na distribuição das comunidades fitoplanctônica e zooplanctônica nos lagos artificiais, assim como o transporte de nutrientes e substâncias tóxicas. Como o tempo de retenção em represas é geralmente menor que em lagos, os processos de produção primária (fotossíntese) pelo fitoplâncton são definidos pela disponibilidade de nutrientes e pela capacidade daquele de se reproduzir para repor a biomassa que é perdida pela descarga nos vertedouros e turbinas (Tundisi and Tundisi, 2008).

3.2 QUALIDADE DE ÁGUA EM LAGOS

A qualidade da água de um corpo hídrico é função do uso e ocupação do solo na bacia hidrográfica, sendo o resultado tanto de suas condições naturais, onde condições como a cobertura e composição do solo influenciam, assim como de atividades antrópicas, seja pelo uso de defensivos agrícolas, despejos domésticos ou industriais, entre outros (Von Sperling,

2014b).

Essa qualidade pode ser expressa através de parâmetros que abordam as principais características físicas, químicas e biológicas desses corpos d'água (Von Sperling, 2014a). Vale ressaltar que os que com legislações específicas para cada fim, como o padrão de potabilidade, determinado pela Portaria 2914/2011, do Ministério da Saúde (Brasil, 2011b) e padrões de lançamento de efluentes e classificação de corpos d'água, disposto nas resoluções CONAMA nº 357/2005 e nº 430/2011 (Brasil, 2005, 2011a).

Alguns dos parâmetros utilizados para a avaliação da qualidade de água em lagos serão descritos nas próximas seções.

3.2.1 Oxigênio Dissolvido

O oxigênio (O_2) é um dos gases mais importantes na dinâmica e na caracterização de ecossistemas aquáticos. Sua concentração depende dos coeficientes de troca do oxigênio entre a atmosfera e a superfície da água, ou seja, a temperatura da água e a pressão atmosférica influenciam diretamente na determinação de sua concentração. Com a elevação da temperatura e diminuição da pressão, a solubilidade do oxigênio diminui. Assim, no que diz respeito à saturação de oxigênio (quantidade máxima que pode ser dissolvida na água), a relação entre esse dado, a temperatura e a pressão atmosférica precisa sempre ser estabelecida (Esteves, 2011; Tundisi and Tundisi, 2008).

As principais fontes de oxigênio na água são a atmosférica, como já citado, e a produção por algas e cianobactérias através da fotossíntese. A primeira ocorre por efeito de processos turbulentos, podendo-se citar como principal forçante em lagos, a ação do vento na superfície da água. Quando esses processos são muito intensos, como em saídas de água em represas, pode-se observar, por vezes, a *supersaturação* do corpo hídrico, que ocorre quando a concentração de oxigênio dissolvido é superior à capacidade de dissolução dos fatores físicos (Siste et al., 2011; Tundisi and Tundisi, 2008).

Já a produção de oxigênio realizada pelas algas e cianobactérias é restrita à zona eufótica e acontece durante o dia devido à incidência de luz. Dessa forma, pode-se dizer que a

concentração de oxigênio dissolvido na coluna d'água está também condicionada à distribuição vertical do fitoplâncton na zona eufótica, assim como à biomassa de macrófitas emersas, fitobentos e perifíton, ou seja, às concentrações de produtores primários. Na seção 3.2.4 mais adiante, serão detalhados os conceitos relativos à dinâmica do fitoplâncton e produção primária, assim como sua importância e fatores que influenciam neste processo.

Os principais fatores relacionados à perda de oxigênio dissolvido são a respiração de plantas e animais aquáticos, assim como a atividade bacteriana de decomposição de matéria orgânica. Eventos de intensas precipitações, por exemplo, podem levar a um alto consumo de oxigênio devido ao carreamento de matéria orgânica pelo escoamento superficial. Esse elevado consumo de oxigênio no corpo hídrico pode levar ao fenômeno conhecido por eutrofização, melhor explicado na seção 3.2.3.

Além disso, a mesma turbulência pela ação do vento citada como responsável pela reeração de lagos, pode também promover uma diminuição considerável de O_2 na água, principalmente em lagos rasos, devido à ressuspensão de sedimentos e matéria orgânica (Tundisi and Tundisi, 2008). A estabilização do sedimento se dá aerobiamente em uma fina camada na parte superior deste, processo que consome oxigênio. Além disso, alguns subprodutos parciais da decomposição anaeróbia podem se dissolver e difundir na camada líquida, exercendo também demanda de oxigênio. Essa demanda é chamada de demanda bentônica ou demanda de oxigênio pelo sedimento (Von Sperling, 2014a).

Cabe destacar a demanda de oxigênio causada pelo processo de oxidação das formas nitrogenadas, melhor explicado na seção 3.2.3. Neste processo, em suma, a amônia presente na coluna d'água é transformada em nitrito, e posteriormente em nitrato, e em ambas as reações ocorre consumo de oxigênio. A esse consumo é dado o nome de demanda nitrogenada, ou ainda demanda de segundo estágio, pois ocorre em fase posterior às reações de desoxigenação carbonácea (ou demanda de primeiro estágio) (Von Sperling, 2014a).

Em lagos tropicais, a variação diária dos padrões de concentração de O_2 assumem importância maior que as variações sazonais, mais influentes em países de clima temperado. Isso acontece porque nos trópicos, as variações anuais de fotoperíodo, intensidade luminosa

e temperatura entre diferentes estações do ano são pouco significativas, sendo as variações ao longo do dia mais expressivas (Esteves, 2011).

Em lagos profundos (acima de 20m de profundidade), as variações das concentrações de oxigênio mais significativas ocorrem no epilímnio, em função, como já citado, principalmente da densidade das populações de produtores primários (Esteves, 2011).

Já em lagos rasos (profundidade abaixo de 6m), as maiores amplitudes de variação são observadas nas camadas superficiais. Em período de cheias, por exemplo, devido ao grande aporte de matéria orgânica e revolvimento do sedimento, as concentrações de oxigênio atingem valores muito baixos. (Esteves, 2011).

Além da estratificação térmica já citada neste trabalho, na maioria dos lagos também ocorre a estratificação química, ou em outras palavras, a distribuição de gases e compostos orgânicos na coluna d'água em camadas horizontais. Em lagos de regiões tropicais, usualmente observa-se uma estratificação química, especialmente do oxigênio, independente da estratificação térmica (Esteves, 2011). Essa estratificação também delinea perfis definidos, sendo eles:

- Distribuição ortograda: Distribuição aproximadamente uniforme em toda a coluna d'água, resultante de uma circulação completa em lago pouco produtivo;
- Distribuição clinograda: Distribuição vertical marcada por um hipolímnio anóxico (sem oxigênio) e concentrações de oxigênio próximas à saturação ou supersaturadas no epilímnio. Típica de lagos estratificados que eutrofizam no verão.
- Distribuição heterograda positiva: Distribuição onde ocorre um aumento nas concentrações de oxigênio dissolvido na parte superior do metalímnio, decorrente do acúmulo de fitoplâncton.
- Distribuição heterograda negativa: Distribuição onde se observa a diminuição do oxigênio dissolvido na porção inferior do metalímnio, usualmente decorrente da concentração de organismos ou de material biológico em decomposição.

- Distribuição anômala: Relativamente rara, distribuição onde ocorre um máximo na concentração de oxigênio no hipolímnio, resultante de mecanismos de transporte e circulação horizontal causado por entrada de águas mais densas e frias.

A Figura 3.3, de Tundisi e Tundisi (2008), mostra os perfis de oxigênio citados acima.

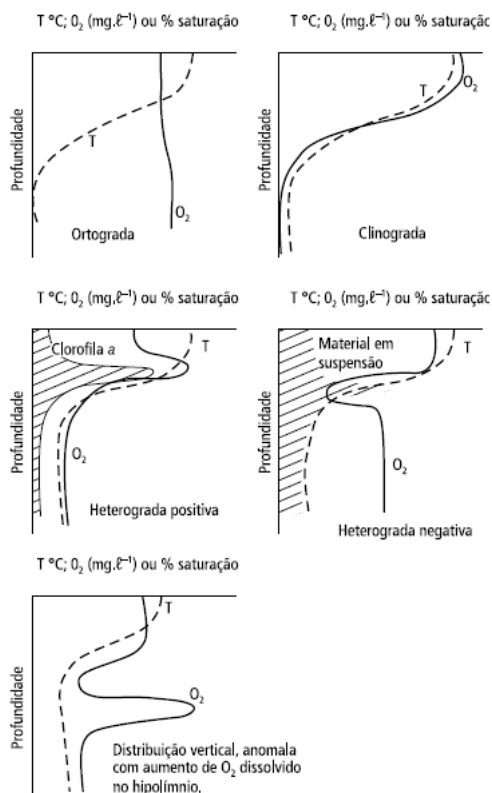


Figura 3.3: Distribuições verticais de oxigênio dissolvido em lagos (Cole, 1983 *apud* Tundisi e Tundisi, 2008)

3.2.2 Matéria Orgânica

A matéria orgânica é formada por diferentes compostos orgânicos oriundos tanto de processos naturais como de atividade antropogênica, podendo ser encontrada em forma dissolvida ou particulada. Pode ser classificada em três categorias principais em relação à sua origem: i) alóctone, quando é proveniente de fora do sistema, como quando é carregada por escoamento superficial; ii) autóctone, quando é produzida pelo próprio sistema, como pelo

zooplâncton ou assimilação microbiana; e iii) alóctone de substâncias orgânicas sintéticas de fontes antropogênicas, como a partir de efluentes domésticos (Sharma et al., 2011).

Os processos que originam a matéria orgânica variam regionalmente, e são dependentes de alguns fatores, sendo eles: propriedades físicas, como a temperatura; funções químicas, como a disponibilidade de nutrientes; e disponibilidade de microorganismos. As fontes antropogênicas de matéria orgânica estão relacionadas a efluentes industriais, domésticos e da agricultura, e representam uma grande fração dos níveis da matéria orgânica total, especialmente em países em desenvolvimento. As atividades relacionadas à agricultura podem liberar uma quantidade significativa de compostos orgânicos derivados de pesticidas e herbicidas (Knapik, 2014).

A matéria orgânica dissolvida (DOM) é degradada principalmente por microorganismos e um de seus componentes principais são as substâncias húmicas, definidas como substâncias orgânicas biogênicas que ocorrem naturalmente e podem ser caracterizadas como amarelas e pretas em cor, de alto peso molecular e refratárias (Tundisi and Tundisi, 2008). Já a particulada (POM) pode ser afetada tanto por atividade microbianas como de animais. Em lagos, os produtores primários (fitoplâncton) formam a matéria orgânica em ambas as formas, e toda a matéria orgânica produzida nos diferentes níveis da cadeia alimentar é utilizada por decompositores (bactérias e fungos). Na presença de oxigênio, a atividade microbiana acelera a transformação de POM e DOM em dióxido de carbono, água e compostos inorgânicos.

Ainda, a matéria orgânica pode ser classificada em lábil ou refratária. A primeira é relacionada à fração de matéria orgânica passível de assimilação e transformação por organismos vivos, como polissacarídeos, proteínas, peptídeos e lipídeos. A refratária, por sua vez, é constituída por compostos quimicamente estáveis resultantes de decomposição bacteriana derivados de vários outros compostos e são mais difíceis de serem assimilados (Zumstein and Buffle, 1989).

Além disso, processos induzidos pela luz também agem na decomposição de POM e DOM, sendo essa uma contribuição significativa na assimilação e degradação da matéria orgânica que ocorre em lagos. A matéria orgânica particulada pode ainda ser depositada no

sedimento e decomposta por atividade microbiana a depender de fatores como geomorfologia e estado trófico do lago (Knapik, 2014).

Para a determinação de matéria orgânica em amostras, dois parâmetros comumente utilizados são a Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) e a Demanda Química de Oxigênio (DQO). O primeiro consiste na medida da quantidade de oxigênio necessária para que a matéria orgânica seja assimilada por microrganismos sob condições apropriadas, e o segundo, apesar de possuir o mesmo princípio, é baseado no consumo de oxigênio a partir da introdução de agentes químicos oxidantes fortes. Alguns dos problemas relacionados a esses dois parâmetros estão associados ao tempo de determinação do primeiro (5 dias), e ao fato de que, no segundo, não somente a matéria orgânica biodegradável é oxidada.

3.2.3 Nutrientes e eutrofização

Carbono, fósforo e nitrogênio são a base para a sustentabilidade e reprodução das populações fitoplanctônicas e outros produtores primários, por constituírem a base dos processos de metabolismo e estrutura das células em combinações com hidrogênio e oxigênio. Esses elementos são denominados macronutrientes, por serem necessários para o crescimento dos organismos em concentrações relativamente elevadas (Pourriot, 1982; Tundisi and Tundisi, 2008).

Os macronutrientes encontram-se geralmente concentrados na matéria orgânica viva, em matéria particulada morta e em decomposição ou dissolvidos na água. Sua distribuição e concentração nas águas é função de processos biológicos, geoquímicos e físicos.

O nitrogênio é um dos elementos mais importantes no metabolismo de ecossistemas aquáticos, devido à sua participação na formação de proteínas. As principais fontes naturais de nitrogênio podem ser: a chuva, material orgânico e inorgânico de origem alóctone e a fixação de nitrogênio molecular dentro do próprio lago (Esteves, 2011). O ciclo do nitrogênio é complexo em razão da existência de uma ampla reserva de nitrogênio na atmosfera, e os processos de transferência entre os diversos compartimentos são extremamente importantes para a produtividade aquática. Os principais processos envolvidos são a nitrificação, a

desnitrificação e a fixação biológica (Tundisi and Tundisi, 2008).

Nitrificação é o processo pelo qual o NH_3 é transformado em NO_2 e NO_3 , processo que ocorre em condições aeróbicas e realizado por organismos como as *Nitrosomonas* e *Nitrobacter*. Já na desnitrificação, ocorre o caminho inverso da nitrificação, ou seja, as bactérias reduzem NO_3 a NO_2 e a nitrogênio gasoso N_2 , que volta à atmosfera. Esse processo ocorre principalmente na ausência de oxigênio ou em condições próximas à anaerobiose, e pode ser considerado um mecanismo de diminuição do nitrogênio em águas com excesso de eutrofização. A fixação biológica de nitrogênio, ou seja, a transformação do nitrogênio molecular em nitrogênio proteico, ocorre em sistemas aquáticos pela atividade de bactérias e cianofíceas. Essa fixação de N_2 atmosférico pode ser bastante significativa no ciclo global (Tundisi and Tundisi, 2008).

O nitrogênio pode ser encontrado sob diversas formas no corpo d'água, sendo elas: formas minerais (N_2 , NH_4^+ , NO_2^- , NO_3^-) e orgânicas (N orgânico dissolvido e particulado) (Pourriot, 1982). As principais formas utilizadas pelas plantas aquáticas são nitrato, nitrito, amônio, compostos nitrogenados dissolvidos como a uréia e aminoácidos livres, e peptídeos. O nitrato inorgânico é altamente solúvel e encontrado principalmente em águas que recebem descarga de esgotos domésticos ou atividades agrícolas.

De modo geral, lagos e represas de regiões tropicais apresentam baixas concentrações de nitratos, resultantes de solos pobre em nitrogênio. Durante o período de estratificação térmica da massa d'água, as concentrações de nitrato são mais baixas do que durante o período de circulação, tanto no epilímnio como hipolímnio. Isto ocorre porque no epilímnio, que fica isolado das camadas inferiores, o nitrato é assimilado pelo fitoplâncton e no hipolímnio com baixas concentrações de oxigênio, ocorre a amonificação de nitrato (Tundisi and Tundisi, 2008; Esteves, 2011).

Em condições naturais, a concentração de amônio também é relativamente baixa no epilímnio. Já em lagos estratificados, a concentração de amônio pode ser muito elevada, principalmente em condições de anoxia, pela redução do nitrato a amônio. Em lagos eutróficos, as concentrações de amônio são afetadas principalmente pela excreção e decomposição de

organismos, podendo variar bastante (Tundisi and Tundisi, 2008).

Comumente, a concentração de nitrito é baixa, visto que este pode ser reduzido quimicamente, além de ser afetado pelas bactérias que oxidam o amônio e reduzem nitrato. Principalmente em águas tropicais, essa concentração está frequentemente abaixo do limite de detecção dos métodos utilizados. Em altas concentrações, o nitrito é extremamente tóxico à maioria dos organismos aquáticos, assim, somente em lagos poluídos a concentração de nitrito pode assumir valores significativos. Em lagos oligotróficos durante todo o ano não se observa nenhuma estratificação de nitrito. Já em lagos eutróficos, durante o período de estratificação térmica, ocorre aumento na concentração deste íon no hipolímnio (Tundisi and Tundisi, 2008; Esteves, 2011).

O fósforo, por sua vez, é um elemento essencial para o funcionamento e para o crescimento das plantas aquáticas, por compor ácidos nucleicos e a adenosina trifosfato nas células. O ciclo do fósforo tem um componente importante nos sedimentos. Como este não apresenta um componente gasoso, sua disponibilidade depende de rochas fosfatadas e das atividades internas dos lagos, como a decomposição e a excreção de organismos (Tundisi and Tundisi, 2008).

Por isso, as formas mais comuns de fósforo orgânico são de origem biológica. Fosfatos dissolvidos são derivados do processo de lixiviação de minerais, destacando-se a apatita. O fosfato liberado de rochas é carregado pelas águas de escoamento superficial e pode alcançar os diferentes ecossistemas aquáticos sob duas formas principais: solúvel (menos provável) e adsorvido às argilas. Esta última é mais frequente em ecossistemas aquáticos tropicais, devido à frequência de solos argilosos nesta região. Já artificialmente, são derivados de esgotos domésticos e industriais, e material particulado de origem industrial contido na atmosfera (Tundisi and Tundisi, 2008; Esteves, 2011)).

Pode ser classificado em fosfato solúvel, fosfato sestônico solúvel em ácido (principalmente fosfato férrico ou fosfato de cálcio), fósforo orgânico solúvel (e coloidal) e fósforo orgânico sestônico. Todas as formas são importantes do ponto de vista limnológico, no entanto, o ortofosfato é mais relevante por ser a principal forma de fosfato assimilada pelas

plantas aquáticas (Tundisi and Tundisi, 2008; Esteves, 2011).

O sedimento, reservatório importante de fósforo em ambientes naturais, apresenta uma camada de oxidação de alguns milímetros de espessura, que funciona como uma barreira para a liberação do fosfato para a coluna d'água. À medida que o hipolímnio se torna anaeróbio, usualmente quando o lago está estratificado termicamente, esta camada de oxidação torna-se menos espessa, podendo desaparecer, possibilitando assim a recirculação do fósforo na coluna d'água. Outra maneira em que o fosfato pode ser recirculado ocorre quando, no epilímnio, o fosfato é rapidamente decomposto pelos microrganismos e reassimilado pela comunidade fitoplanctônica (Tundisi and Tundisi, 2008; Esteves, 2011).

Na maioria dos lagos tropicais, o perfil de oxigênio é do tipo clinogrado. Nesses ecossistemas, durante o período de estratificação térmica, observa-se acentuado aumento de concentração das diferentes frações de fosfato com a profundidade, independente do nível de produção fitoplanctônica.

A eutrofização pode ser definida como um tipo de processo de enriquecimento de nutrientes de qualquer corpo d'água, resultando em um crescimento excessivo de fitoplâncton e macrófitas. Esse crescimento indesejado das plantas aquáticas e subsequente morte, forma um lodo esverdeado na superfície da água, que reduzindo a penetração da luz, impede tanto a produção primária como a re-oxigenação da água pela atmosfera (Ansari, 2010).

O processo de eutrofização é natural e ocorre em todos os sistemas aquáticos em centenas de anos. No entanto, atividades antropogênicas que levam a uma alta entrada de nutrientes no corpo hídrico podem levar a um desenvolvimento dessa condição em um período muito curto de tempo, o que tem sido denominado de eutrofização artificial (Ansari, 2010; Tundisi and Tundisi, 2008).

A taxa e o tempo de progressão da eutrofização em um lago ou reservatório, considerando uma carga constante de nutrientes, depende, dentre outros fatores, do estado trófico inicial do lago, pois em lagos hipereutróficos, por exemplo, a adição de nutrientes causa pouca resposta devido à carga já existente; sua profundidade média, que influencia na diluição dos nutrientes e conseqüentemente, na concentração por volume ou área; e do tempo de retenção, pois se

muito curto, há maior perda de fitoplâncton (Tundisi and Tundisi, 2008).

As principais causas da eutrofização podem ser atribuídas às entradas de águas residuárias domésticas e industriais, à drenagem superficial e a fertilizantes utilizados na agricultura (Tundisi and Tundisi, 2008). Isso pode ser explicado pela quantidade de nutrientes em esgotos domésticos, que no caso de esgotos brutos, tem como formas predominantes a amônia e o nitrogênio orgânico, sendo a maior parte destes de origem fisiológica. O fósforo presente em esgotos domésticos também tem origem fisiológica, assim como devido aos detergentes e outros produtos de limpeza (Mota and Von Sperling, 2009). Da mesma forma, os fertilizantes utilizados na agricultura também são ricos em nitrogênio e fósforo, e seu excesso é carregado pela drenagem superficial para os corpos d'água, sendo uma das fontes de poluição difusa.

Uma das maiores preocupações no que tange à eutrofização, é o florescimento de cianobactérias, que além dos efeitos gerais de aumento da matéria orgânica, pode gerar diferentes tipos de toxinas, sendo prejudicial tanto para a biota aquática como para a saúde humana. Como as mesmas têm nos vacúolos gasosos uma das principais adaptações à flutuação, durante a floração localizam-se principalmente nas camadas superficiais da coluna d'água. A floração mais conhecida é aquela formada pela alga *Oscillatoria rubescens*, que confere coloração à água. Em águas brasileiras, usualmente as florações são causadas por *Microcystis aeruginosa* e várias espécies de *Anabaena* (Esteves, 2011).

Pode-se ainda enumerar algumas consequências da eutrofização por cianobactérias como: i) ausência de oxigênio na água (anoxia), provocando mortalidade em massa de peixes e invertebrados; ii) altas concentrações de matéria orgânica que, em águas que são usadas para abastecimento humano, podem produzir substâncias carcinogênicas se tratadas com cloro; iii) acesso restrito à pesca e atividades recreacionais; iv) acentuada queda na biodiversidade e número de espécies de plantas e animais; v) efeitos crônicos e agudos na saúde humana devido à produção de toxinas por diferentes espécies (Tundisi and Tundisi, 2008).

Quanto ao estado trófico, os lagos podem ser classificados em ultraoligotróficos, oligotróficos, mesotróficos, eutróficos, supereutróficos e hipereutróficos, variando de corpos d'águas

limpos e de baixa produtividade primária até corpos d'água afetados significativamente pelas elevadas concentrações de matéria orgânica e nutrientes, nessa ordem (Cetesb, 2007).

3.2.4 Comunidade fitoplanctônica e produção primária

O fitoplâncton é constituído de algas microscópicas e cianobactérias, células isoladas ou reunidas em colônias, cujo tamanho varia entre 1 a $2\mu\text{m}$ e $50\mu\text{m}$. Também pode ser descrito como bactérias por algumas espécies apresentarem células procarióticas (organismos sem um núcleo de célula ou qualquer outra organela ligada à membrana). São ligeiramente mais densos que a água, e por isso, tendem a sedimentar, ou, nos casos dos organismos flagelados móveis, são suscetíveis a migrar dentro da zona pelágica (Pourriot, 1982; Harris, 1987).

Todos esses organismos contêm Clorofila-a, que, à exceção das cianobactérias, está localizada dentro dos Cloroplastos, organela responsável pela fotossíntese. Nas cianobactérias, a clorofila fica dispersa pelo hialoplasma e em lamelas fotossintetizantes, que são ramificações da membrana plasmática. A associação da Clorofila e pigmentos auxiliares, confere tanto às algas como às cianobactérias, cores diferentes em cada grupo, como por exemplo as algas verdes, onde dominam a Clorofila a e b (Pourriot, 1982; Streit et al., 2005).

As cianobactérias, anteriormente conhecidas como algas azuis, têm seu nome originado a partir de um de seus principais pigmentos, a ficocianina, que confere a estes organismos a coloração azul-esverdeada. Algumas Cyanophyta, especialmente aquelas possuidoras de heterocistos, são de fundamental importância na fixação biológica de nitrogênio em lagos, e podem ser tanto autotróficas como mixotróficas (assimilação de compostos orgânicos), possibilitando que vivam nas partes profundas de lagos na ausência de luz (Esteves, 2011).

A maioria das espécies fitoplanctônicas derivam a maior parte da sua energia da fotossíntese, de forma que os maiores fatores ecológicos que influenciam em sua dinâmica são comum a todos os organismos fotossintetizantes: luz, temperatura, e o suprimento de nutrientes (Harris, 1987). A produção primária pode ser definida como a quantidade de matéria orgânica acrescida pela fotossíntese ou quimiossíntese em um dado intervalo de tempo e é um processo complexo, onde os fatores supracitados podem tanto inibi-la como estimulá-la

(Esteves, 2011).

A fotossíntese é influenciada pela qualidade, quantidade e duração da luz. Em relação à qualidade, refere-se ao tipo da luz incidente (em relação ao comprimento de onda). Estudos mostram que a luz azul e vermelha causam danos à estrutura dos cloroplastos, levando à fotoinibição, caracterizada por uma redução lenta da fotossíntese (Steward et Codd, 1978 *apud* Pourriot, 1982; (Aguilera et al., 2000; Wang et al., 2016).

De forma similar, o excesso de luz também leva à fotoinibição, como exemplificado na Figura 3.4. Como se pode observar, a produção primária aumenta progressivamente à medida que a radiação aumenta, até que atinge um valor máximo ($F_{m\acute{a}x}$), e então começa a decair. Esse valor máximo apresenta uma relação diretamente proporcional à temperatura (Tundisi and Tundisi, 2008). Semelhantemente, em relação à duração, estudos mostram que exposição prolongada da comunidade fitoplanctônica à luz saturante reduz progressivamente à taxa da fotossíntese (Pourriot, 1982).

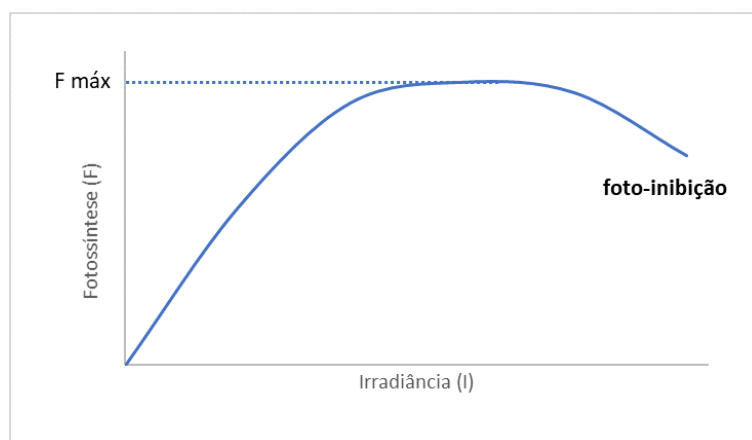


Figura 3.4: Diagrama representativo da fotoinibição.

Admite-se geralmente que a fotossíntese se anula na profundidade onde a luz alcança 1% da intensidade da superfície, ou até o limite inferior da zona eufótica (Pourriot, 1982). Em lagos profundos, pode-se observar uma adaptação dos pigmentos das cianobactérias às mudanças qualitativas e quantitativas de radiação. Esta adaptação permite que esta, em determinadas condições de radiação, realize o máximo de assimilação e, conseqüentemente, obtenha o máximo de produtividade, o que explica a distribuição das cianobactérias em todo

o ecossistema lacustre (interface água-ar, coluna d'água, sedimento, entre outros) (Esteves, 2011).

A relação entre a quantidade de nitrogênio e fósforo dissolvidos e o desenvolvimento do fitoplâncton, mostra que aquela limita não só a biomassa, mas também a taxa de crescimento. A biomassa vegetal é determinada pelo elemento menos abundante (limitante) em relação à demanda da comunidade fitoplanctônica, e a taxa de crescimento, se todas as condições são favoráveis, aumenta com a concentração do elemento nutritivo limitante. Este aumento se dá segundo uma curva de saturação, tendendo a uma taxa máxima em altas concentrações (Tundisi and Tundisi, 2008; Pourriot, 1982).

Como já citado, o nitrogênio é um macronutriente de extrema importância para o fitoplâncton, pois é utilizado principalmente na síntese de proteínas e aminoácidos, e sua forma mais comum em águas naturais bem oxigenadas, é o nitrato. A forma amoniacal é preferencialmente absorvida pelo fitoplâncton caso as duas formas estejam disponíveis, no entanto, em altas concentrações, o íon amônio pode inibir o crescimento de algumas delas. Ainda, as cianobactérias que possuem heterocistos podem ser fixadoras de N_2 , apesar da taxa de fixação deste elemento ser reduzida quando o nitrato e o íon amônio estão disponíveis. De modo geral, as taxas de assimilação e fixação dessas três formas são altamente dependentes da temperatura e da presença de luz (Pourriot, 1982).

O fósforo regula a produtividade das plantas aquáticas devido ao seu papel intracelular de sínteses moleculares e transporte de íons, sendo a assimilação deste nutriente pelos vegetais basicamente sob a forma do íon ortofosfato (PO_4^{3-}), e a taxa de assimilação diretamente proporcional à temperatura. O fósforo adsorvido nos sedimentos podem também constituir uma fonte importante em águas pouco profundas (Tundisi and Tundisi, 2008; Pourriot, 1982).

Esse elemento, em geral, é encontrado em concentrações mais baixas que as necessárias para um crescimento rápido e sustentável do fitoplâncton, sendo usualmente o nutriente limitante dos sistemas aquáticos. Alguns autores constataram relações empíricas entre a concentração solúvel do fósforo e a biomassa fitoplânctônica (Clorofila-a), sendo possível, em alguns casos, prever essa biomassa a partir dos dados fósforo:clorofila (Tundisi and

Tundisi, 2008).

O conceito de nutriente limitante está relacionado ao fato de que a elaboração de biomassa nova pelas plantas aquáticas não pode prosseguir na falta de um ou mais nutrientes. Tanto o nitrogênio como o fósforo podem ser limitante (ou outro nutriente), dependendo das características do sistema considerado. O carbono pode ser limitante principalmente quando ocorre saturação de nitrogênio e fósforo na água, mas a limitação por estes últimos é muito mais comum.

As diferentes espécies de fitoplâncton apresentam diferentes requerimentos nutricionais, uma vez que podem assimilar nutrientes a diferentes taxas. As proporções relativas e as concentrações de nitrogênio e fósforo em lagos e represas podem variar sazonalmente ou de ano para ano, portanto, a limitação de nutrientes pode variar temporal e até espacialmente.

O índice de Redfield (Redfield et al., 1963) estabelece uma relação estequiométrica conceitual em que o fitoplâncton pode assimilar nutrientes da coluna d'água, sendo ela 106C:16N:1P, ou ainda, levando-se em consideração somente o fósforo e nitrogênio, 16N:1P. Dessa forma, ao estabelecer a concentração e relação C:N:P da coluna d'água, pode-se comparar com o índice de Redfield e determinar qual desses nutrientes está em excesso e qual é o nutriente limitante.

3.3 MODELOS ECOLÓGICOS

Os primeiros modelos ecológicos datam da década de 1920, com as equações de Lotka-Volterra (presa-predador), seguidas do uso de equações diferenciais para descrição do crescimento das populações hospedeiro-parasita por Nicholson e Bailey na década de 1930. Somente na década de 1960 que o uso da tecnologia para abordagens científicas deu início a uma nova geração de modelos ecológicos, sendo que na década de 1970, muitos modelos de eutrofização foram desenvolvidos devido às preocupações com a qualidade da água que surgia na época. Então, na década de 90 e nos anos 2000 uma gama cada vez maior de modelos passou a ser utilizada, como os modelos baseados em indivíduos (IBM), redes neurais artificiais (ANN), modelos estruturalmente dinâmicos (SDMs) e modelos difusos (Fath et al.,

2011).

Os modelos podem ainda ser classificados sob diferentes aspectos, como modelos distribuídos, quando variáveis e parâmetros dependem do espaço e/ou do tempo, ou de modo contrário, concentrados; estocásticos, quando o conceito de probabilidade e chance de ocorrência das variáveis é introduzido na formulação do modelo, ou determinísticos; conceituais, quando levam em consideração os conceitos físicos relacionados aos processos hidrológicos ou empíricos (Tucci, 2005); e ainda, quanto ao número de suas dimensões espaciais.

Modelos unidimensionais são recomendados para estudos ecológicos sob escalas temporais maiores, e devido à sua simplicidade, podem ser vantajosos por sua agilidade em tipos específicos de aplicações. O modelo GLM (*Generalized Linear Model*) é um exemplo de um modelo de código aberto com estudos recentes demonstrando performance satisfatória na modelagem de lagos (Menció et al., 2017; Read et al., 2014).

Na Universidade de Brasília (UnB), tanto no Programa de Pós Graduação em Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos (PTARH) como no Departamento de Engenharia Civil (ENC), os trabalhos utilizando o GLM mostram a consolidação e desenvolvimento da linha de pesquisa de modelagem de lagos em diferentes áreas de estudo no Distrito Federal. O trabalho de Pinto (2018), aplicado ao reservatório Descoberto (DF), conclui que o modelo é uma boa ferramenta para a representação da dinâmica térmica desta área de estudo, sendo possível investigar, por exemplo, a influência do sedimento nas camadas mais profundas do reservatório.

Barbosa (2015), aplicou esse modelo ao lago Paranoá, para simular a dinâmica do fitoplâncton e a qualidade da água desse corpo hídrico. Além de uma análise de sensibilidade para identificação dos principais parâmetros de influência nas variáveis de interesse, foram realizadas simulações de cenários de eutrofização, com situação de qualidade semelhante aos períodos mais críticos do lago em décadas anteriores, obtendo bons resultados e resposta condizente do modelo ao cenário de piora de qualidade da água.

Quando a escala de interesse é voltada às características do escoamento, modelos com maiores resoluções são recomendados, como os modelos CE-QUAL-W2 (bidimensional) ou

o Delft3D (tridimensional) (Missaghi and Hondzo, 2010; Soullignac et al., 2019). Apesar de despenderem maior custo computacional, a escolha da estrutura do modelo e grau de complexidade deve ser ponderada para cada caso, levando em conta princípios de parcimônia.

Além do custo computacional, o processo de calibração desses modelos pode ser dispendioso, e algoritmos com a finalidade de calibração com diferentes técnicas de otimização para auxiliar neste processo vêm sendo desenvolvidos e utilizados nos últimos anos. Dentre os métodos mais comuns de otimização, destacam-se os Algoritmos Genéticos (GA) e o método de otimização por enxame de partículas (do inglês *Particle Swarm Optimization* ou PSO).

A otimização por Algoritmos Genéticos consiste nos seguintes passos: i) é definida uma população inicial de indivíduos, que se torna a primeira geração do algoritmo; ii) para cada geração, haverá um número de filhos criados pela combinação das características de dois indivíduos pais, determinados por métodos de seleção aleatórios. A seleção de características dos pais é aleatória, e há um risco de pequenas mutações; iii) uma vez que o número requerido de filhos forem criados, as populações como um todo são ajustadas pela substituição dos piores indivíduos na população pelos novos filhos (Wilson and Mantooth, 2013).

A PSO, por sua vez, apesar de bastante similar à primeira, se diferencia por ser uma técnica multi-objetivo, lançando mão de uma abordagem heurística, mas sem garantia de uma solução ótima. Ela utiliza uma população de indivíduos (“um enxame”) em vez de um único indivíduo. O algoritmo então, move a população inteira no espaço em busca de uma solução potencial. Cada indivíduo no enxame tem uma posição e velocidade definidas, o algoritmo procura em cada caso estabelecer a melhor saída utilizando o enxame atual, e então o enxame inteiro move para a nova localização relativa (Wilson and Mantooth, 2013).

Destaca-se aqui também o *Shuffled Complex Evolution Method* (SCE-UA), desenvolvido na Universidade do Arizona (*The Arizona University*) por Duan et al. (1992), baseado em uma síntese das melhores propriedades de vários métodos existentes (incluindo GA). Este método também se baseia na combinação de população, evolução sistemática de conjunto de pontos, evolução competitiva (pois apenas populações “mais fortes” sobrevivem), e apre-

senta como diferencial, a reorganização complexa. Uma vez que cada complexo de população é evoluído, estes são redistribuídos em uma única população, aumentando a sobrevivência das comunidades pelo compartilhamento de informação (sobre o campo de busca) adquirido independentemente por cada comunidade.

Neste trabalho, foi escolhido o modelo CE-QUAL-W2 para modelagem da nossa área de estudo pela continuidade de trabalhos desenvolvidos nos já mencionados PTARH e ENC da UNB há alguns anos (Liporoni, 2012; Barros, 2018), além de trabalhos em andamento (Nunes, 2018), sendo este um modelo amplamente difundido na modelagem da qualidade de água em rios, lagos e reservatórios (Afshar and Saadatpour, 2009; Noori et al., 2015; Brito et al., 2018; Diogo et al., 2008; Ha and Lee, 2008). Dentre suas principais vantagens, destaca-se a de que é um modelo de código aberto e em pleno desenvolvimento, sendo sua última versão (4.2) do ano de 2019.

Nas próximas seções, serão detalhados o procedimento e informações necessárias para uso do modelo, assim como algumas das equações e processos internos para o cálculo das variáveis de qualidade da água aqui mencionadas.

3.3.1 CE-QUAL-W2

O CE-QUAL-W2 é um modelo bidimensional que compreende um módulo hidrodinâmico e um módulo de qualidade de água, desenvolvido pela U.S. Army Corps of Engineer's Waterways Experiment Station em parceria com a Portland State University. Esse modelo assume homogeneidade lateral, ou seja, é indicado particularmente para sistemas com pouca variação lateral dos constituintes de qualidade da água, e para corpos d'água longos e estreitos (Ha and Lee, 2008).

No módulo hidrodinâmico, o modelo calcula elevações do nível d'água, velocidades (longitudinal e vertical) e temperaturas. Esse módulo utiliza as equações de Navier-Stokes para cálculo do fluxo incompressível no campo de velocidade do corpo de água e coeficientes de difusão turbulentos.

Os cálculos de qualidade da água são feitos após o cálculo hidrodinâmico, permitindo a

troca de informação entre as variáveis dos dois módulos. No módulo de qualidade da água, o modelo é capaz de simular mais de 60 variáveis, como Nitrito e Nitrato, Matéria Orgânica Dissolvida Lábil e Refratária, grupos de Fitoplâncton, Oxigênio Dissolvido, entre outros (Cole and Wells, 2019).

Para aplicação do modelo, os seguintes dados precisam ser fornecidos: dados geométricos, condições iniciais, condições de contorno, parâmetros hidráulicos, cinéticos e os dados de calibração. Os dados geométricos são utilizados para a representação do corpo d'água por diferenças finitas, e são utilizados mapas topográficos e a tabela volume \times área \times elevação de projeto.

Em relação aos parâmetros hidráulicos, os coeficientes de dispersão e difusão também são necessários. A última versão também permite que o usuário especifique coeficientes de atrito do fundo do corpo d'água segundo a equação de Chézy ou de Manning. Para os parâmetros cinéticos, há mais de 120 coeficientes necessários, importantes quando da calibração da qualidade da água.

Dessa forma, quando o programa é iniciado, é feita uma avaliação com um pré-processador para verificar se todos os dados requeridos foram inseridos, para então começar a calibração e simulações do modelo. Possíveis limitações do modelo estão associadas, como já dito, às considerações que variações laterais podem ser desprezadas, como variações nas velocidades, temperaturas e constituintes; às simplificações nas interações do módulo de qualidade da água; e, além disso, as reações relacionadas ao sedimento. Estas reações podem ser simuladas de três formas: um modelo de ordem 0 que varia apenas com a temperatura, não estando acoplado à coluna d'água; um modelo de ordem 1 que está relacionado à sedimentação de matéria orgânica, mas apenas modela o decaimento de matéria lábil sob condições não anóxicas; e um modelo de diagênese do sedimento que modela a cinética no sedimento e na interface água-sedimento. Devido à complexidade deste último, dados para realizar esta análise pode ser uma limitação primária.

Em relação ao módulo de qualidade da água, serão detalhados os fluxos internos levados em consideração no modelo para cálculo das variáveis mencionadas em seções anteriores.

As equações que regem esses processos podem ser encontradas no Apêndice A. Vale destacar que nas imagens, as caixas cinzas representam variáveis que não foram simuladas nesse estudo, e as setas vermelhas e verdes indicam perdas e fontes, respectivamente. Outro ponto importante a se salientar é que o modelo utiliza a variável “algas” para simular toda a comunidade fitoplanctônica (apesar de permitir a simulação de mais de um grupo), e por isso, nos fluxogramas e outros resultados de saída do modelo, é encontrado o termo “algas”, se referindo tanto às algas como às cianobactérias.

- **Oxigênio Dissolvido:** O modelo CE-QUAL-W2 simula o Oxigênio Dissolvido como demonstrado na Figura 3.5. Como pode-se observar, as principais perdas de OD se dá pelo decaimento das diversas formas de matéria orgânica (LDOM, LPOM, RDOM, RPOM), sendo também contabilizada a DBO carbonácea (CBOD) e a demanda realizada pelo sedimento; além disso são também consideradas as perdas de oxigênio na nitrificação (vale ressaltar que o CE-QUAL-W2 simula o nitrito e o nitrato como uma única variável), e a respiração de algas (fitoplâncton). Como principal fonte, tem-se a fotossíntese e a troca com a atmosfera (que também pode indicar perdas). Ainda, não simuladas nesse estudo, tem-se a perda por oxidação de diferentes compostos, a respiração do zooplâncton, macrófitas e epífiton, assim como a fotossíntese realizada por esses dois últimos.
- **Matéria Orgânica:** a matéria orgânica, por sua vez, é dividida em Matéria Orgânica Dissolvida Lábil (LDOM), Matéria Orgânica Dissolvida Refratária (RDOM), Matéria Orgânica Particulada Lábil (LPOM) e Matéria Orgânica Particulada Refratária (RPOM).
 - **LDOM:** O fluxo de LDOM, representado na Figura 3.6, tem como principais fontes a mortalidade e excreção das algas (fitoplâncton), macrófitas e epífiton (esses dois últimos não simulados neste trabalho), e como perdas, o decaimento de LDOM na mineralização de compostos orgânicos e inorgânicos e o decaimento de LDOM para RDOM.

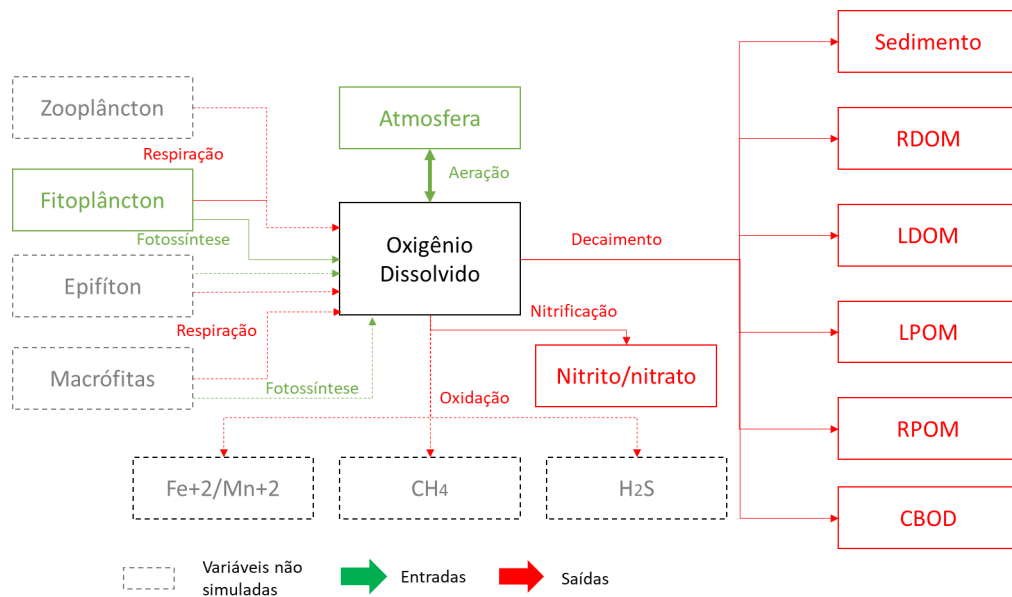


Figura 3.5: Fluxo de Oxigênio Dissolvido no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

- RDOM: De forma similar, o fluxo de RDOM dentro do modelo tem como fonte o decaimento de LDOM, e também é perda na mineralização de compostos orgânicos e inorgânicos (Figura 3.7).
- LPOM: Para a LPOM, mais variáveis estão envolvidas no processo, sendo elas: a mortalidade de algas (fitoplâncton), macrófitas, epifíton e zooplâncton (esses três últimos não simulados neste trabalho). O zooplâncton também é fonte através da excreção, assim como consome a LPOM pela alimentação. LPOM também é perdida pela sedimentação e pelo decaimento para RPOM, assim como na mineralização de compostos orgânicos e inorgânicos (Figura 3.8).
- RPOM: Similarmente, a RPOM é obtida a partir do decaimento da LPOM, e também perdida pela sedimentação, assim como pelo decaimento na mineralização de compostos orgânicos e inorgânicos (Figura 3.9).
- Nitrogênio: A modelagem do nitrogênio no CE-QUAL-W2 é feita a partir de duas variáveis, a amônia, e o nitrato-nitrito, este último sendo simulado no modelo como

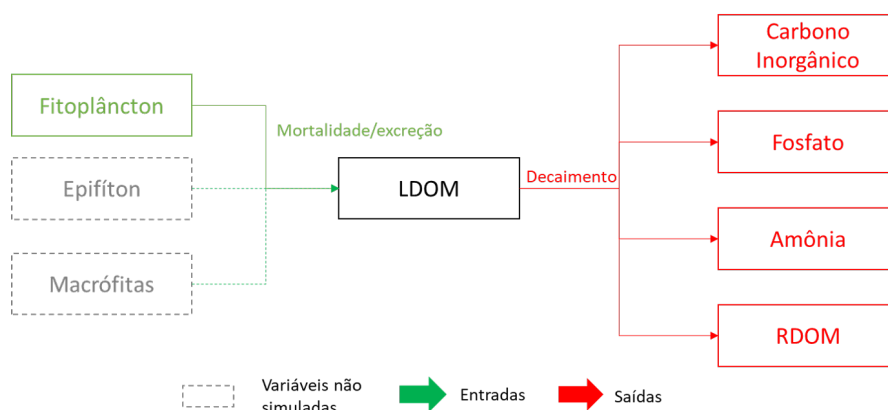


Figura 3.6: Fluxo de Matéria Orgânica Dissolvida Lábil no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

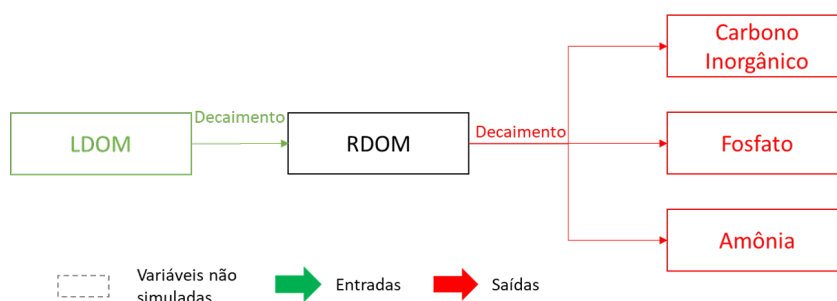


Figura 3.7: Fluxo de Matéria Orgânica Dissolvida Refratária no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

uma única variável.

- Amônia: A amônia é formada pelo decaimento dos diversos tipos de matéria orgânica, pode ser liberada pelo sedimento em condições aneróbias, e ainda, produto da respiração de zooplâncton, algas (fitoplâncton), macrófitas e epifítton. De maneira inversa, porém, é consumida durante a fotossíntese realizada por esses três últimos, por participar da formação de proteínas durante esse processo. Ainda, é também consumida no processo de nitrificação e sua oxidação para nitrito e nitrato, como demonstrado na Figura 3.10.
- Nitrato-Nitrito: Dessa forma, como pode-se observar na Figura 3.11, a principal fonte de nitrato-nitrito é a supracitada nitrificação da amônia, e como perdas, a desnitrificação, tanto na coluna d'água como pelo sedimento. De forma similar à amônia, o nitrato-nitrito também pode ser consumido por algas (fitoplâncton) e

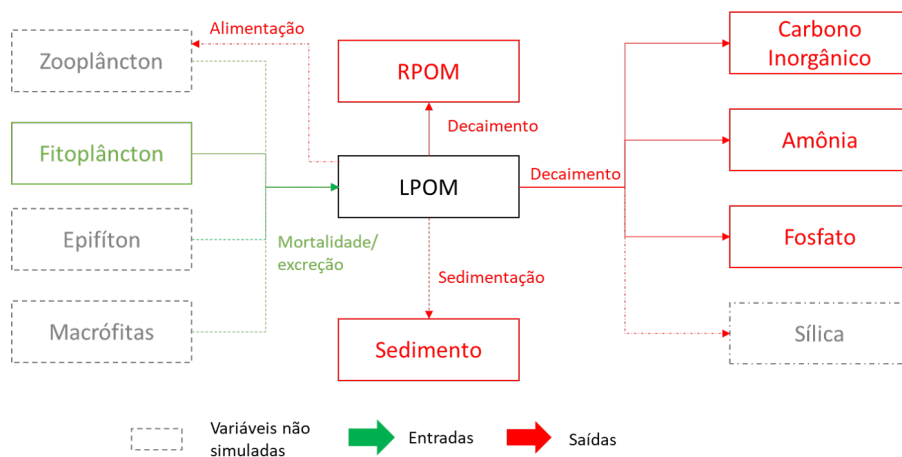


Figura 3.8: Fluxo de Matéria Orgânica Particulada Lábil no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

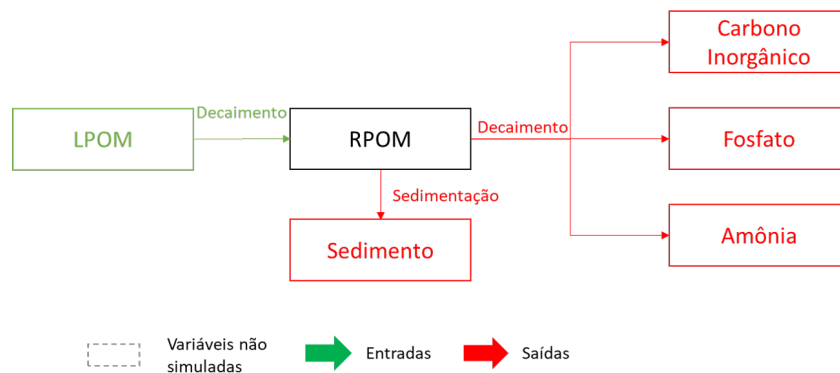


Figura 3.9: Fluxo de Matéria Orgânica Particulada Refratária no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

epifíton quando da fotossíntese a depender da preferência de cada grupo.

- Fósforo: Em relação ao fósforo, que no modelo, assume-se estar completamente na forma de ortofostato (PO_4) e utilizado pelo fitoplâncton. O fosfato, por sua vez, também tem como principais fontes o decaimento da matéria orgânica e a respiração por algas (fitoplâncton), macrófitas, epifíton, zooplâncton e liberação pelo sedimento sob condições anaeróbias. O que difere em relação às perdas em comparação com a amônia, é que o fosfato também pode ser perdido no sistema por adsorção ao sedimento e a própria sedimentação (Figura 3.12).
- Sedimento: Como já citado, e desconsiderando a modelagem de diagênese do sedimento, o CE-QUAL-W2 pode simular as reações relativas ao sedimento de duas for-

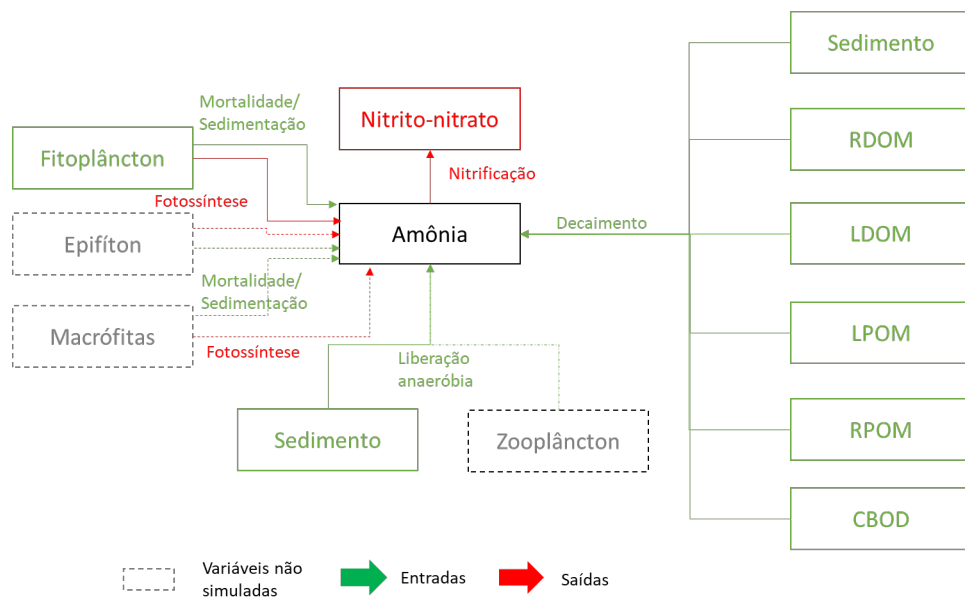


Figura 3.10: Fluxo de Amônia no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

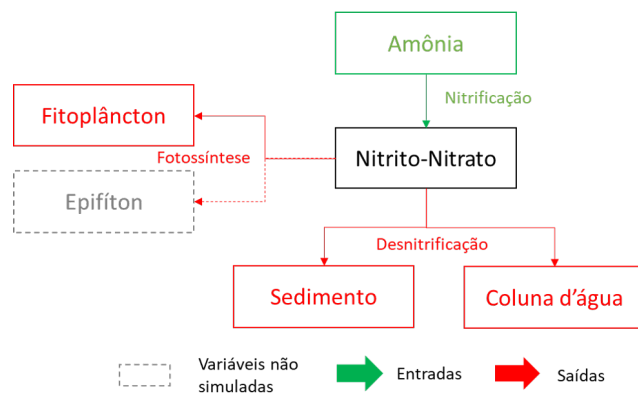


Figura 3.11: Fluxo de Nitrito-Nitrato no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

mas. A primeira (Figura 3.13) usa uma reação de ordem 0, ou seja, uma liberação e demanda constante. Nesse caso, as taxas não variam ao longo do tempo e variam de acordo com a temperatura. Dessa forma, os parâmetros relacionados à dependência da temperatura e taxas de decaimento são de extrema importância. O segundo método (Figura 3.14) utiliza uma reação de ordem 1, utilizando assim o acúmulo de sedimentos para permitir seu decaimento. O modelo permite a utilização de ambos os métodos na mesma simulação.

- Algas (fitoplâncton): Por fim, as algas, que aqui representam toda a comunidade fitoplânctonica, podem ser representadas como um único ou múltiplos grupos no modelo.

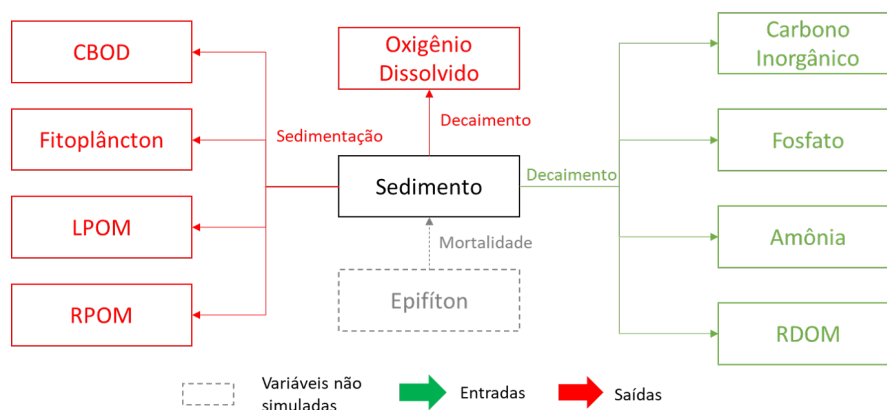


Figura 3.14: Fluxo interno entre compartimento de sedimento com reações de ordem-1 e outros compartimentos (adaptado de Cole, 2019).

3.3.2 Levantamento bibliográfico de parâmetros

O modelo CE-QUAL-W2 requer uma série de parâmetros para cada variável de decisão a ser simulada que pode tornar a etapa de calibração dispendiosa. Por isso, foi feito um levantamento bibliográfico dos principais parâmetros calibrados para as variáveis relacionadas a nutrientes e fitoplâncton, variáveis de interesse neste estudo. O levantamento foi realizado através do banco de dados do Portal de Periódicos Capes/MEC ².

O parâmetro apontado com maior influência para a calibração do Oxigênio Dissolvido foi o SOD, ou a Demanda de Oxigênio pelo Sedimento (Dehbalaei and Javan, 2018; Sadeghian et al., 2018). O manual do modelo também aponta esse parâmetro como de principal importância na calibração desta variável, e explicita que o mesmo pode variar amplamente a depender das características da área de estudo, sendo encontrado valores na literatura no intervalo de 0,1 a 5,3 gO₂m²d⁻¹ (Cole and Wells, 2019). Nos trabalhos considerados nesta etapa, valores mais altos foram encontrados em lagos encontrados em clima tropical (Deus et al., 2013).

Para o módulo de nutrientes e de fitoplâncton, mais parâmetros precisaram ser considerados. Nas Tabelas 3.2 e 3.3 estão dispostos os trabalhos utilizados como referência, assim como o local de estudo e a quantidade de parâmetros calibrados em cada um deles para o módulo de nutrientes e de fitoplâncton, respectivamente. Vale ressaltar que o modelo precisa

² <http://www-periodicos-capes-gov-br.ez54.periodicos.capes.gov.br>

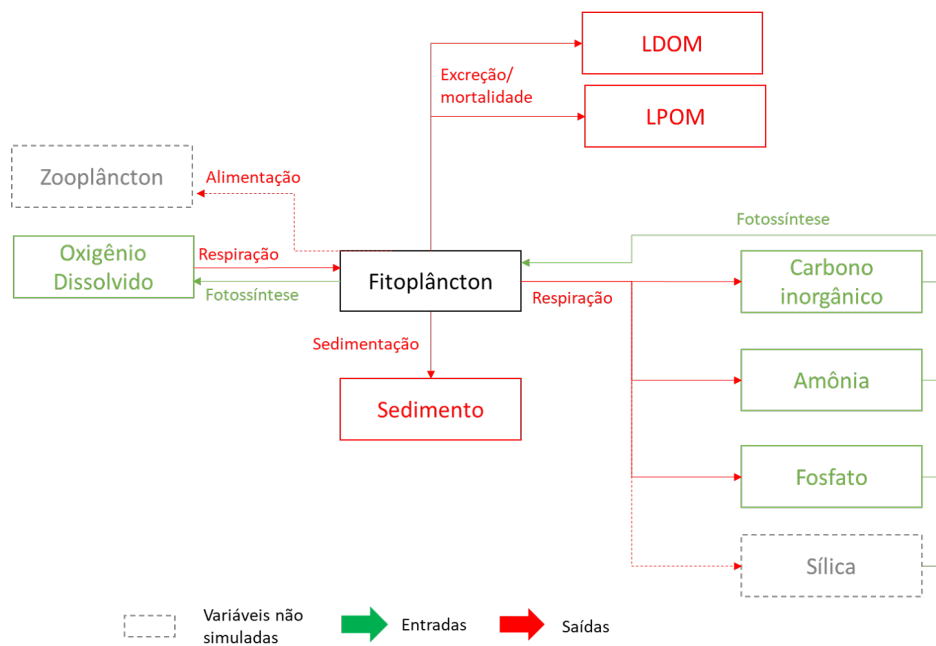


Figura 3.15: Fluxo de Fitoplâncton no CE-QUAL-W2 (adaptado de Cole, 2019).

da entrada de 19 parâmetros no primeiro módulo e 27 parâmetros no segundo. As células em cinza na Tabela 3.2 são os trabalhos em que os parâmetros encontrados foram comuns aos dois módulos. Assim, na coluna “parâmetros encontrados” consta a quantidade de parâmetros encontrados para nutrientes/fitoplâncton nos trabalhos em comum.

Desta forma, levando-se em consideração os parâmetros que eram calibrados com maior frequência nos trabalhos encontrados, resume-se os principais parâmetros para cada variável, assim como seu intervalo de variação, valores médios e desvio padrão tanto para os nutrientes como para o fitoplâncton. Esses valores são encontrados nas Tabelas 3.4 e 3.5.

3.3.3 Histórico e aplicações do modelo

O modelo CE-QUAL-W2 foi desenvolvido em 1975 sob o título de LARM (*Laterally Averaged Reservoir Model*), com sua primeira aplicação em um reservatório sem afluentes. Modificações posteriores permitiram a inclusão de múltiplas ramificações assim como de condições de contorno para estuários, resultando no código chamado de GLVHT (*Generalized Longitudinal-Vertical Hydrodynamics and Transport Model*). Por fim, a adição dos algoritmos de qualidade da água em 1986 resultaram no hoje conhecido CE-QUAL-W2.

Tabela 3.2: Levantamento de estudos contendo os parâmetros do modelo CE-QUAL-W2 usualmente calibrados no módulo de nutrientes e fitoplâncton.

Autor	Local de estudo	Parâmetros encontrados (nutrientes - algas)
Bartholow et al., 2001	California, EUA	11 - NA
Cole e Tillman, 2001	Atlanta, EUA	12 - NA
Dahbalaei e Javan, 2018	Ilam, Irã	4 - NA
Bai e Lung, 2005	Patuxent Estuary, EUA	13 - 20
Zhang et al., 2008	Lago Erie, EUA	12 - 17
Afshar e Saadatpour, 2009	Reservatório Karkheh, Irã	2 - 12
Rangel-Peraza et al., 2012	Reservatório Aguamilpa, México	2 - 8
	Reservatório Mingder, Taiwan	2 - 8
	Lago Waco, Texas	2 - 8
Deus et al., 2013	Tucuruí, Brasil	2 - 8
Lian et al., 2014	Three Gorges Dam, China	2 - 8
Chang et al., 2015	Reservatório Hsinshan, Taiwan	4 - 5
Zouabi-Aloui e Gueddari, 2015	Sejname Dam, Tunísia	3 - 4
Dahbalaei et al., 2016	Ilam, Irã	4 - 8
Torres et al., 2016	Reservatório Sancho, Espanha	4 - 17
Sadeghian et al., 2017	Lago Diefenbaker, Canadá	5 - 18
Brito et al., 2018	Reservatório Enxoé, Portugal	4 - 9
Chuo et al., 2019	Three Gorges Dam, China	14 - 26

*NA - parâmetros relacionados ao fitoplâncton não aplicados no estudo.

Células em cinza - trabalhos que realizaram a calibração dos módulos de "nutrientes" e "fitoplâncton".

Os primeiros registros podem ser encontrados em diversos relatórios técnicos da U.S. Army Corps of Engineers da década de 80. Em 1986, o modelo já com seu módulo de qualidade foi aplicado ao lago DeGray, no estado de Arkansas, nos Estados Unidos (Martin, 1987). Como uma das primeiras aplicações do modelo, apresentou uma performance adequada para entendimento de fatores que influenciavam tanto as variações hidrodinâmicas como de qualidade da água da área de estudo. Nesse último módulo, foram simulados Oxigênio Dissolvido, Ferro Total, Nitrito-Nitrato, Amônia, Fosfato, Algas (fitoplâncton), Matéria Orgânica Dissolvida (à época ainda sem maior discretização), Sólidos Dissolvidos Totais, Sólidos Suspensos Inorgânicos e Coliformes. O modelo conseguiu simular bem regiões de anoxia no lago, assim como a liberação de ferro e nutrientes pelo sedimento sob condições anóxicas. Neste trabalho, já se previu a necessidade da identificação dos diferentes tipos de matéria orgânica e aplicações em diferentes sistemas para avaliar inteiramente a capacidade

Tabela 3.3: Levantamento de estudos contendo os parâmetros do modelo CE-QUAL-W2 usualmente calibrados no módulo referente ao fitoplâncton.

Autor	Local de estudo	Parâmetros encontrados
Debele et al., 2006	Cedar creek, TX, USA	20
Kuo et al., 2006	Central Taiwan (Reservatórios Te-Chi e Tseng-Wen)	8
Liu et al., 2009	Reservatório Mingder, Taiwan	
Williams et al., 2014	Reservatório Aguamilpa, México	8

Tabela 3.4: Parâmetros calibrados com maior frequência no módulo de nutrientes, seus valores médios, mínimos, máximos e desvio padrão.

Parâmetro		N	Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo
Fosfato	Taxa de liberação pelo sedimento (PO4R)	10	0.0106	0.01561	0.001	0.05
Amônia	Taxa de liberação pelo sedimento (NH4R)	11	0.0464	0.0486	0.001	0.15
	Taxa de decaimento (NH4DK)	19	0.1447	0.1619	0.001	0.5
Nitrito-Nitrato	Taxa de decaimento (NO3DK)	19	0.1432	0.256	0.03	1

do modelo, que foram adicionados em versões posteriores.

Hoje, o modelo conta com registros de uso em mais de cem países, com quantidades expressivas nos Estados Unidos (783), Coreia (232), Canadá (152), e Brasil, este com 125 aplicações registradas (Cole and Wells, 2019). Os estudos publicados mostram as diferentes possibilidades de aplicações do modelo, com finalidades abrangendo o entendimento do sistema e identificação de fatores limitantes e de maior influência no processo de eutrofização, simulação de cenários e investigação de melhores práticas de gestão para melhoria de qualidade da água de reservatórios. Ainda, estudos também têm mostrado a possibilidade de acoplamento do modelo com modelos de bacia e algoritmos computacionais com a finalidade de calibração a partir de técnicas de otimização.

No Brasil, os trabalhos utilizando o CE-QUAL-W2 em reservatórios são mais recentes, e muitos dos trabalhos encontrados na literatura simulam apenas o módulo hidrodinâmico. Liporoni (2012) aplicou seu estudo no lago Paranoá, mas o módulo de qualidade da água não foi calibrado. Foi realizada inicialmente uma análise de sensibilidade para identificação dos

Tabela 3.5: Parâmetros calibrados com maior frequência no módulo de fitoplâncton, seus valores médios, mínimos, máximos e desvio padrão.

Parâmetro/Métrica	N	Média	Desvio Padrão	Mínimo	Máximo
Taxa de crescimento (AG)	21	2.054	0.325	0.34	5
Taxa de respiração (AR)	20	0.039	0.010	0.02	0.05
Taxa de excreção (AE)	20	0.032	0.002	0.01	0.04
Taxa de mortalidade (AM)	20	0.072	0.0631	0.01	0.2
Taxa de sedimentação (AS)	21	0.088	0.0782	-0.1	0.3
Saturação por Fósforo (AHSP)	18	0.014	0.01753	0.0005	0.05
Saturação por Nitrogênio (AHSN)	17	0.031	0.0372	0	0.14
Saturação pela luz (ASAT)	20	122.5	0.015	0	350

parâmetros de maior influência deste módulo, e, após a verificação dos cinco parâmetros mais influentes (coeficiente de atrito de fundo, coeficiente de abrigo/atenuação do vento, fração da radiação solar incidente absorvida na superfície da água, coeficiente de troca de calor de fundo e valor máximo do coeficiente de difusão vertical) para este módulo no modelo, foram simulados valores bastante satisfatórios para a temperatura.

Gastaldini et al. (2012) estudaram a estratificação térmica no reservatório Vacacaí-Mirim, no estado do Rio Grande do Sul, utilizado para abastecimento doméstico. Observaram que, apesar de valores simulados obtidos serem muito próximos dos observados, o modelo apresentou certa dificuldade em simular o aquecimento das camadas superiores quando da estratificação do reservatório. Em relação ao oxigênio dissolvido, também houve boa precisão dos valores simulados, mas a maior discrepância se deu na profundidade de 1 metro, onde, no período de floração das algas e cianobactérias (verão), os valores foram superiores à saturação.

Em 2018, Kuchinski and Cauduro Gastaldini (2018) aplicaram o modelo mais uma vez no reservatório Vacacaí-Mirim, ampliando a gama de variáveis para amônia, nitrito-nitrato, fosfato e clorofila-a. A calibração foi considerada satisfatória para todas as variáveis, exceto para nitrito-nitrato, o que foi uma resposta inesperada do modelo, visto que a calibração para amônia apresentou bons resultados. Os autores apontam que uma possível explicação para esse comportamento é o fato do modelo simular as duas formas de nitrogênio como uma unidade, indicando que talvez o modelo não tenha sido capaz de descrever com acurácia os

processos de nitrificação e desnitrificação.

Destaca-se ainda o trabalho de Deus et al. (2013), com o objetivo de avaliar o impacto da piscicultura na qualidade de água do reservatório Tucuruí, no Pará, simulando, dentre outras variáveis, fósforo, amônia, nitrato, Clorofila-a e oxigênio dissolvido. Observou-se uma performance satisfatória do modelo, com melhor simulação para o ortofosfato, e pior para o nitrato, mas ainda assim, coerentes. Os autores observam nesse trabalho a necessidade de se utilizar a Clorofila-a como indicador chave para avaliação do estado trófico, já que os nutrientes podem estar em excesso no ambiente sem promover produção primária.

Um avanço no uso desse modelo é o acoplamento com modelos de bacias, de forma a compreender as interações entre esses dois ambientes, tanto em aspectos quantitativos como qualitativos. Debele et al. (2008) acoplaram o modelo de bacia SWAT ao CE-QUAL-W2 e aplicaram ao reservatório Cedar Creek, no estado do Texas, Estados Unidos. Apesar da necessidade de adaptações intermediárias para adequação dos arquivos de saída e entrada dos dois modelos, os resultados foram satisfatórios para a simulação hidrodinâmica indicando a compatibilidade dos dois modelos e possibilidade de usá-los para avaliar a gestão de recursos hídricos em bacias complexas. Apesar dos autores apontarem como satisfatória a simulação das variáveis de qualidade da água, muitos dos erros encontrados foram justificados pela qualidade dos dados de entrada devido à propagação de erros de um modelo para o outro, inclusive a falta de dados sobre a partição da matéria orgânica.

Brito et al. (2018) investigaram a origem da eutrofização do reservatório Enxoé, em Portugal, acoplando o CE-QUAL-W2 também a um modelo para simulação da bacia hidrográfica afluyente a fim de avaliar as melhores práticas de gestão para reduzir o nível trófico da área de estudo. Esse reservatório também tinha o abastecimento humano como principal uso, e histórico de floração de cianobactérias, o que levava à interrupção da distribuição de água para a população. Dentre as variáveis simuladas, destacam-se o nitrato, a amônia, ortofosfato, clorofila-a e oxigênio dissolvido. Algumas conclusões importantes desse estudo foram: i) a tendência do modelo a subestimar o oxigênio dissolvido próximo ao fundo do reservatório durante o verão, o que poderia ser explicado devido aos elevados processos de

decaimento de oxigênio que ocorrem nessa região (mineralização, nitrificação), pouca produção pelo fitoplâncton e grande deposição do oxigênio da superfície durante o inverno, em vez de ser perdido ou consumido; ii) dificuldade em simular o tempo exato de ocorrência de eventos relacionados a qualidade da água, apesar das ordens de magnitude, valores máximos e mínimos terem sido reproduzidos pelo modelo.

Ainda, em relação ao uso de calibradores, Ostfeld and Salomons (2005) construíram um modelo híbrido com a combinação de um método de “corrida de obstáculos”, do algoritmo do vizinho mais próximo e de algoritmo genético acoplados ao CE-QUAL-W2. O primeiro é formulado para aceitar ou rejeitar um conjunto de parâmetros durante uma simulação do CE-QUAL-W2. O segundo, para aproximar a superfície resposta da função objetivo, e o último, para ligar os dois algoritmos. O modelo híbrido se mostrou robusto e produziu resultados similares ao de Algoritmos Genéticos puros, mas reduzindo o tempo e esforço computacional.

Afshar et al. (2011) utilizaram o método de otimização por enxame de partículas (PSO) a partir da percepção de que a evaporação influenciava fortemente tanto o perfil térmico como a elevação do nível da água no reservatório, indicando que uma técnica multi-objetivo se fazia necessária. Dessa forma, o objetivo do otimizador foi a minimização da soma ponderada dos desvios totais de temperatura e do nível da água simultaneamente. Os autores apontam que a calibração foi eficiente e acurada, principalmente em comparação com outro trabalho realizado por eles na mesma área de estudo (Afshar and Saadatpour, 2009) onde foi realizada uma calibração manual. Ainda, em comparação com o uso de GA em trabalhos anteriores, concluíram que a PSO levou a boas soluções com um número menor de gerações criadas.

Ainda, no Distrito Federal, Barros (2018) adaptou a técnica de otimização SCE-UA em Python para uma aplicação no reservatório Descoberto para simulação hidrodinâmica do reservatório. O autor também obteve resultados satisfatórios, fornecendo uma rotina computacional replicável capaz de automatizar e agilizar os processos de calibração. Observou ainda, a partir de análise de sensibilidade, que o principal parâmetro a ser calibrado no módulo hidrodinâmico é o Coeficiente de Abrigo do Vento (*Wind Sheltering Coefficient - WSC*).

3.4 O LAGO PARANOÁ

O lago Paranoá, localizado na Bacia do Paranoá (Brasília - DF), foi criado em 1959 com objetivos principalmente paisagísticos, recreativos e para geração de energia elétrica (Menezes Jr. et al., 2001), além da diluição de efluentes. Seu formato possibilita a divisão desse corpo hídrico em quatro braços e um corpo central, sendo os braços denominados de acordo com seus principais rios afluentes: Riacho Fundo, Ribeirão do Gama, Ribeirão Torto e Ribeirão Bananal (Figura 3.16), que será a forma que o lago será tratado nesse trabalho.

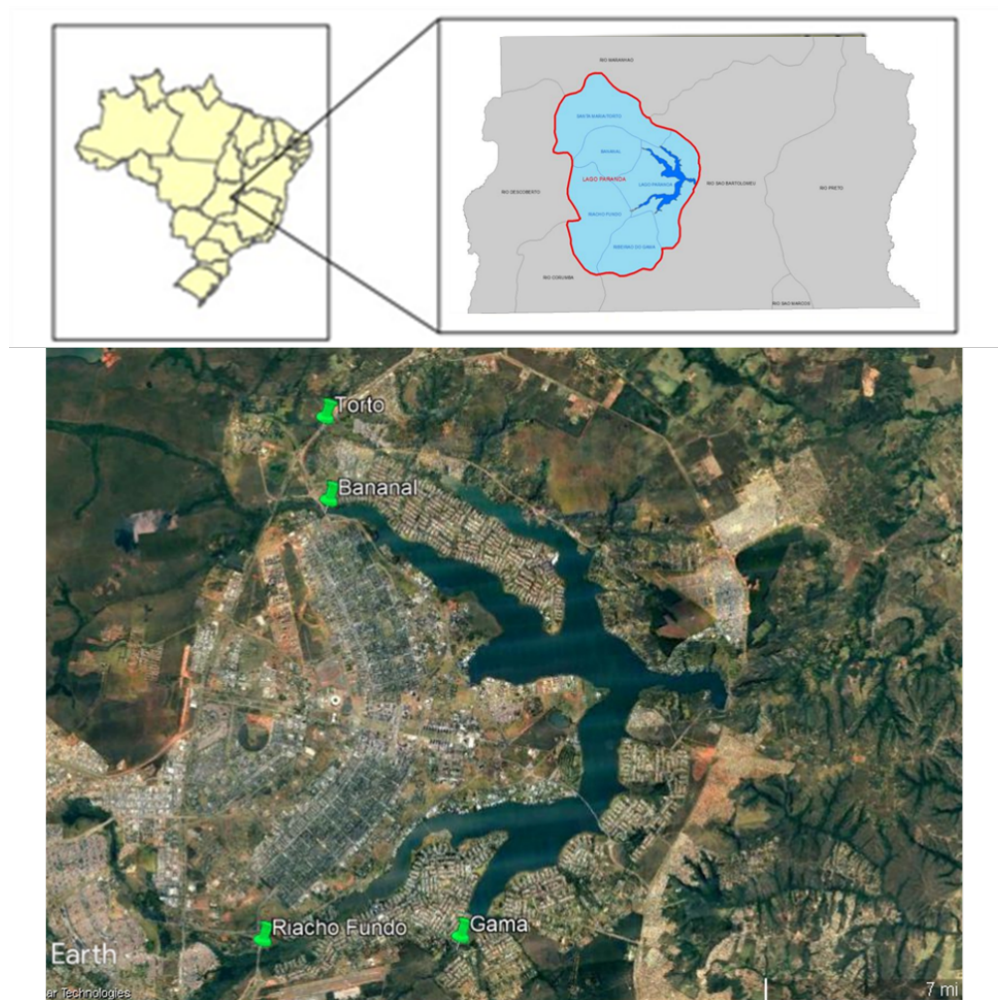


Figura 3.16: Localização da bacia hidrográfica do Paranoá dentro do Distrito Federal, e do Lago Paranoá na bacia, assim como a identificação dos braços pelos nomes dos rios afluentes (adaptado de Araújo e Souto (2013)).

No ano seguinte à sua inauguração, deu-se início às atividades da estação de tratamentos de efluentes ETE Sul, localizada no braço do Riacho Fundo e que contava com tratamento

convencional. Nesta mesma década, passou-se a observar florações de Cyanobacteria no braço do Bananal, e o braço do Riacho Fundo era considerado fortemente eutrófico devido ao lançamento de esgotos sem tratamento (Oliveira and Krau, 1970). Em 1969, foi inaugurada a segunda estação de tratamento de efluentes que tem esse lago como corpo receptor, a ETE Norte. À época, também com tratamento convencional.

Esse problema perdurou ao longo das décadas, e, na década de 1970, a Caesb iniciou o monitoramento limnológico no lago. Enell (1977 apud Philomeno, 2007) relacionou a eutrofização às cargas de nutrientes provenientes das estações de tratamento de esgotos e do Riacho Fundo, e com as contínuas florações de algas e cianobactérias e mortandade maciça de peixes, também deu-se início a testes de precipitação de fósforo solúvel para aumentar a concentração de Oxigênio Dissolvido (Philomeno, 2007).

Com recorrência dos problemas de eutrofização, na década de 80, outras medidas emergenciais para melhoria da qualidade da água do lago foram aplicadas, como a adição de algicida para controle da floração de cianobactérias, especificamente de *Microcystis aeruginosa* e *Anabaenopsis raciborskii*, com estudos reafirmando que a principal contribuição de fósforo no lago era proveniente das estações de tratamento (Pereira, 1985 apud Philomeno, 2007).

Assim, na década de 90, as duas estações foram ampliadas, visto que, à época, já estavam subdimensionadas para a população da cidade de Brasília, e passaram a dispor de tratamento terciário para remoção de nutrientes (Burnett et al., 2001). No final dessa década, acredita-se que ocorreu uma manobra operacional das compostas do vertedor da barragem, que teria resultado na redução do tempo de residência do reservatório (*flushing*), o que teria então provocado vários efeitos aparentemente positivos, como o aumento da transparência da água, diminuição da concentração de clorofila-a, e uma mudança nas espécies dominantes a comunidade fitoplanctônica (Elmoor-Loureiro, 2004). No entanto, a Companhia Energética de Brasília (CEB), responsável pela operação das comportas, não reconhece ter feito a operação.

Philomeno (2007) analisa a comunidade fitoplanctônica do lago em três períodos dife-

rentes, denominadas de fase 1, 2 e 3, representando, respectivamente, o período anterior ao *flushing* (1997 e 1998), logo após a melhoria nas condições ambientais (1999 e 2000), e seis anos após o *flushing* (2005). A autora observa que, na fase 1, a espécie dominante era a cianobactéria *Cylindrospermopsis raciborskii*, que desaparece logo após a redução do tempo de residência do lago, mas que volta a aparecer na fase 3, sugerindo um regresso às condições antes do *flushing*.

Batista and Fonseca (2018) analisaram amostras nos anos de 2009 a 2010 no lago, em relação a nutrientes e biomassa algal. Além dos diferentes grupos encontrados, especial atenção se deve à presença de táxons com potencial para promover sabor e odor na água (e.g., diatomáceas, criptofíceas e cianobactérias) ou que poderiam obstruir filtros em sistemas de tratamento (e.g., diatomáceas). Além disso, foram encontradas cianobactérias (e.g., *Aphanocapsa* e *Planktolyngbya*) em densidades que já apontam a necessidade de intensificação do monitoramento e análise de cianotoxinas.

Nos últimos anos, mais de um caso de mortandade de peixes foi noticiado no lago Paranoá e no rio Paranoá, à jusante da barragem ¹. As possíveis causas levantadas para esse fenômeno estão mais uma vez relacionadas à crescente urbanização, com especial foco às margens dos seus afluentes como na sub-bacia do Riacho Fundo, região com grande ocupação e que, na caracterização da qualidade da água pelo monitoramento da Caesb, apresenta resultados classificados como “aceitável” a “ruim” nos critérios da companhia (Caesb, 2005; GDF, 2012).

Ainda, em 2016, os principais reservatórios de abastecimento humano da cidade de Brasília (Descoberto e Santa Maria) se encontravam em situações críticas de escassez hídrica, chegando a um volume útil igual ou inferior a 40% (Adasa, 2016), levando a, no segundo semestre de 2017, ser iniciada a captação de água no lago Paranoá para abastecimento hu-

¹ "Ibram investiga causa da morte de milhares de peixes no Rio Paranoá", Correio Brasiliense, publicado em 04/07/2017, disponível em: https://www.correiobraziliense.com.br/app/noticia/cidades/2017/07/04/interna_cidadesdf,607137/morte-de-peixes-no-paranoa.shtml;

"GDF culpa ocupações irregulares por morte de peixes no Lago Paranoá", Metrôpoles, publicado em 22/12/2016, disponível em: <https://www.metropoles.com/distrito-federal/meio-ambiente/gdf-culpa-ocupacoes-irregulares-por-morte-de-peixes-no-lago-paranoa>

mano.

Dessa forma, dado o contexto histórico e recentes questões levantadas na literatura, faz-se necessário um acompanhamento regular e criterioso da qualidade da água desse corpo hídrico, assim como o desenvolvimento de estudos para aprimoramento da compreensão a respeito dos processos limnológicos e de qualidade da água nesse ambiente, utilizando, por exemplo, os citados modelos ecológicos.

4 METODOLOGIA

A metodologia deste trabalho está resumida na Figura 4.1. Nas próximas seções, será detalhado o processo de escolha da área de estudo (Seção 4.1), assim como suas principais características (4.2). A base de dados de qualidade do lago utilizada (Seção 4.3), foi fornecida pela Caesb e consolidada por Nunes (2018), o determinou as variáveis a serem simuladas no modelo e respectivo período de simulação.

Foi então realizado um levantamento bibliográfico para identificação de principais parâmetros calibrados em cada variável, assim como seu intervalo de variação, para posterior inserção no algoritmo de calibração e no modelo, detalhado na Seção 3.3.2.

Então, é descrito o processo de preparação dos arquivos de entrada e condições iniciais e de contorno do modelo (Seção 4.5), assim como descrição dos dados utilizados para construção desses arquivos, e por fim, é detalhada a configuração do algoritmo de calibração, os cenários de calibração realizados e as métricas para análise dos resultados (Seção 4.6).

4.1 DEFINIÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

Este trabalho foi realizado com base em outros dois trabalhos no Programa de Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos da Universidade de Brasília (PTARH/UnB) que também utilizavam o modelo CE-QUAL-W2 (Barros, 2018; Nunes, 2018). O trabalho de Nunes (2018) tem como principal objetivo estudar o sistema da Bacia Hidrográfica do Paranoá, analisando os efeitos das variáveis intervenientes no Lago com foco nos processos hidrodinâmicos e físico-químicos. Com um aprimoramento dos dados utilizados por Liporoni (2012), que também utilizou o CE-QUAL-W2, incluindo algumas modificações dos arquivos de entrada para possibilitar a análise da interação bacia-lago, o trabalho prévio desses autores foi fundamental para permitir a realização desta pesquisa, voltada ao aprofundamento do entendimento referente ao módulo de qualidade de água do modelo, a partir da aplicação no estudo do lago Paranoá.

O trabalho de Barros (2018), apesar de se tratar de outra área de estudo, desenvolveu

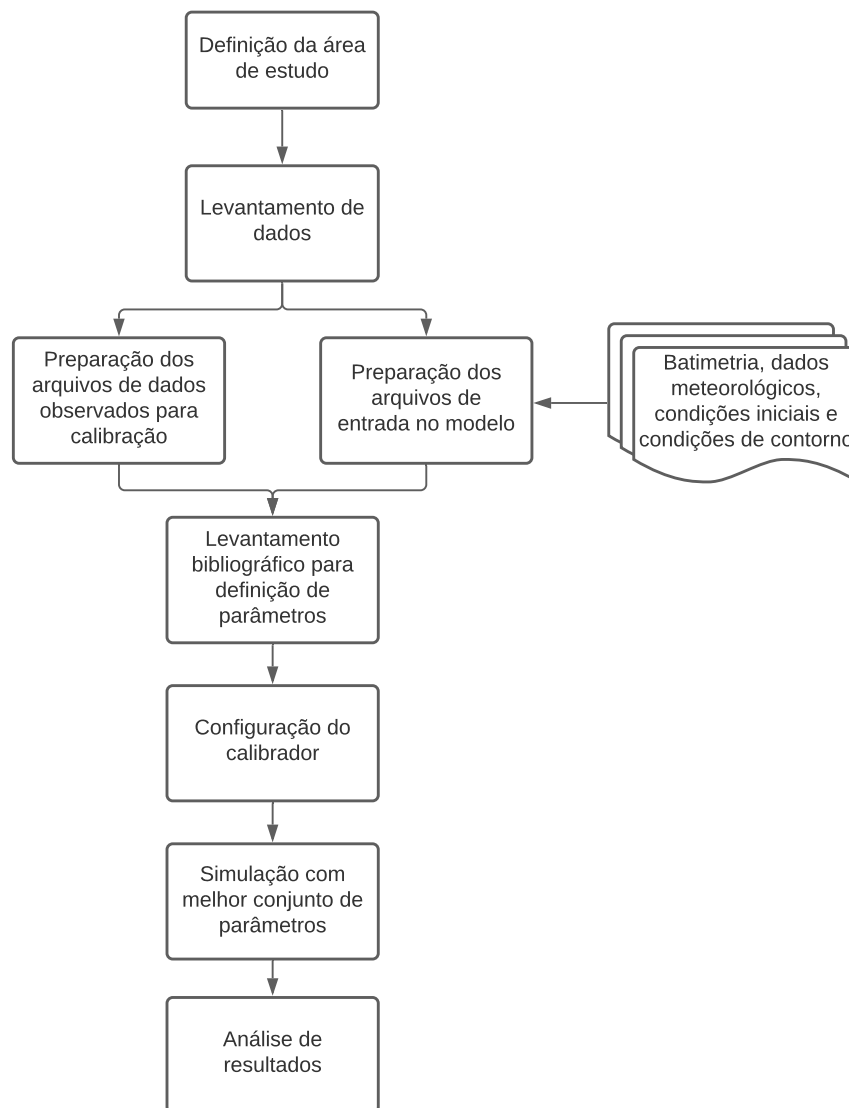


Figura 4.1: Fluxograma com o resumo das etapas deste trabalho.

o algoritmo de calibração aplicado ao CE-QUAL-W2, que foi adaptado e utilizado neste trabalho. A comunicação contínua entre os trabalhos aqui mencionados possibilitaram o avanço na simulação da qualidade da água com o modelo, o que ainda não havia sido possível realizar em trabalhos anteriores.

Assim, pelo histórico de trabalhos nessa área de estudo, e por conseguinte, disponibilidade de dados e produção científica já realizada, além da já mencionada importância do Lago Paranoá para a cidade de Brasília e diferentes Regiões Administrativas que o utilizam, seja para recreação ou mais recentemente, consumo humano, é que se escolheu essa área de

estudo neste trabalho.

4.2 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

O Distrito Federal está localizado em área de predominância do clima tropical úmido (AW, segundo a classificação de Köppen). Esse clima é caracterizado por uma estação chuvosa no verão e uma estação seca no inverno. No DF, especificamente, as médias de precipitação são inferiores a 50 mm entre maio e agosto, e nos meses de novembro a fevereiro apresentam médias superiores a 200 mm. As menores temperaturas médias ocorrem nos meses junho e julho, alcançando valores levemente mais baixos que 18°C, e as maiores no começo da primavera (setembro e outubro), quando ultrapassam 22°C (GDF, 2012).

As bacias hidrográficas do DF estão demonstradas na Figura 4.2. Seus principais corpos hídricos são:

- rios Maranhão e Paranã: pertencentes as bacia hidrográfica dos rios Tocantins/Araguaia;
- rios Descoberto, Corumbá, Paranoá, São Bartolomeu e São Marcos: pertencentes à bacia hidrográfica do rio Paraná; e
- rios Preto, Urucuia e ribeirão Entre Ribeiros: pertencentes à bacia hidrográfica do rio São Francisco.

O relevo que se desenvolveu nessa área é de serras alongadas e estreitas, em alguns trechos associadas a chapadas de topos planos e altos. A bacia do rio Paranoá drena em direção ao rio São Bartolomeu, nascendo na Chapada da Contagem onde as altitudes são da ordem dos 1200 metros. Nessa bacia, está localizado o Parque Nacional de Brasília na porção mais alta, e a área urbana da cidade na porção média. O padrão de relevo nesta área é de mesa e a drenagem é dendrítica, aumentando em direção ao rio São Bartolomeu, onde a altitude é de 900 metros (GDF, 2012).

Em relação ao uso do solo, a bacia do rio Paranoá apresenta uma área expressiva ocupada por atividades antrópicas (35,38%) e uma pequena parte por uso agrícola, localizada próxima

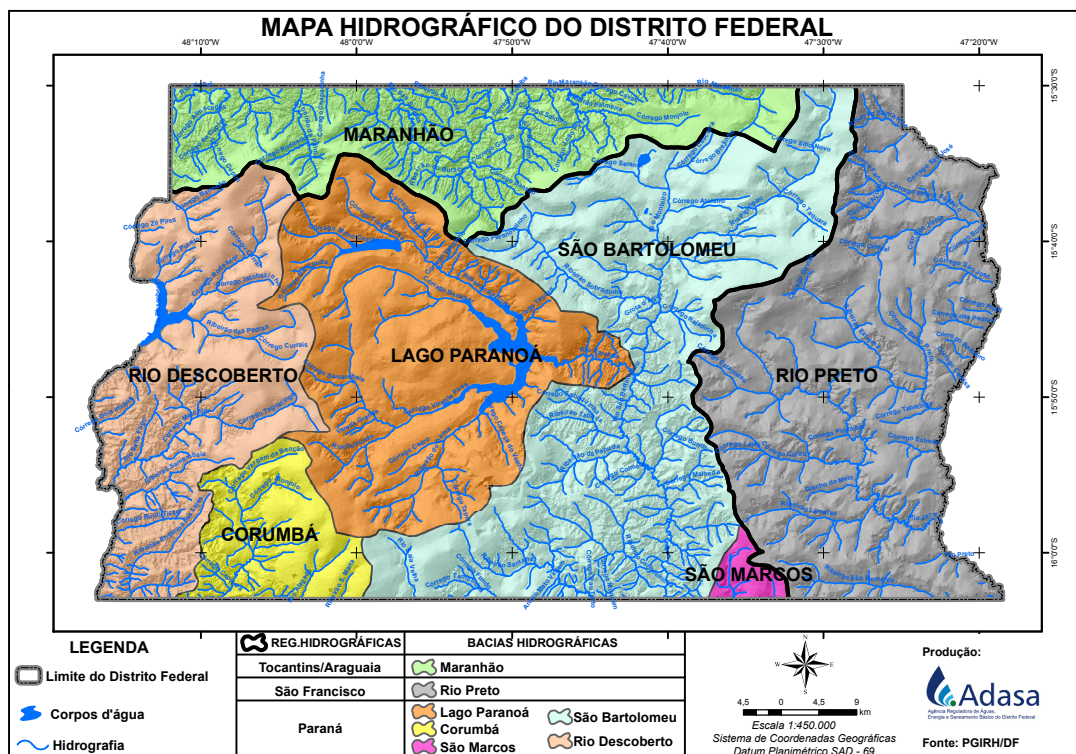


Figura 4.2: Bacias Hidrográficas do Distrito Federal (Adasa, 2020).

aos limites da bacia, sendo assim caracterizada como uma bacia predominantemente urbana. Além da grande área urbanizada, a bacia também tem cobertura do solo expressiva pelo cerrado, que recobre 22,39% do total, na região do Parque Nacional de Brasília. Em relação à vegetação predominante, ocorrem três classes no DF: savana gramíneo lenhosa com floresta de galeria, savana parque com floresta de galeria e savana parque sem floresta de galeria. Na bacia do rio Paranoá, são encontradas as duas primeiras (GDF, 2012).

Com uma elevada densidade populacional, no âmbito socioeconômico, essa bacia também é marcada por apresentar uma das maiores rendas per capita de todo o país, assim como o nível educacional, o que influi diretamente na demanda por recursos hídricos. Cerca de 96% do consumo de água nesta bacia corresponde a consumo humano. Por conseguinte, a bacia do lago Paranoá recebe atualmente a maior contribuição de esgotos sanitários provenientes da população urbana do DF (GDF, 2012).

À época do Plano de Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos do DF (2012), quando a região ainda não havia enfrentado a já mencionada crise hídrica que se instalou

nos anos de 2016 a 2018, o balanço entre disponibilidade e demanda hídrica na região já apontava algumas restrições para o uso da água. Na bacia do Paranoá, a demanda total chegava a corresponder entre 55 a 57% da disponibilidade nos meses de agosto e setembro. A vazão média consumida chegava a 20,1% da Q_{90} na bacia do Paranoá e as vazões médias de retirada chegavam a 50% da $Q_{7,10}$.

A Companhia de Saneamento Ambiental do Distrito Federal (Caesb) possui uma rede de monitoramento de qualidade de água extensa na região, monitorando até 25 parâmetros, sendo a coleta de amostras realizada em local próximo aos pontos de captação nos mananciais superficiais e nas saídas dos poços profundos nas captações de água subterrânea. Apenas na bacia do rio Paranoá, são 12 pontos de monitoramento, dentre estações de monitoramento em água superficiais e subterrâneas, além de cinco pontos no lago Paranoá, no qual são executadas amostragens mensais em quatro pontos dos braços do lago em uma única profundidade, e no ponto mais próximo à barragem é coletado o perfil em quatro profundidades (1m, 10m, 15m, 20m e 25m). As estações utilizadas neste trabalho estão demonstradas mais adiante (Figura 4.11).

Em 2012, os dados de Oxigênio Dissolvido (OD) monitorados nessas estações permaneceram acima de 6 mg OD/L, limite estabelecido pela Resolução CONAMA 357/2005 para corpos d'água classe 1, para nove das treze estações de monitoramento de qualidade das águas superficiais operadas pela CAESB nessa bacia. As estações que apresentaram valores abaixo de 6 mg OD/L foram Catetinho Nascente, ETA Brasília (ETA.BSB.001), Santa Maria 15,75m (CAP.SMR.001 (15,75m)) e Santa Maria 8,75m (CAP.SMR.001 (8,75m)). Com exceção da estação Santa Maria 15,75m, que apresentou resultados compatíveis com corpos d'água classe 3, as demais estações apresentaram valores compatíveis com corpos d'água classe 2. Esses valores estão frequentemente associados à poluição orgânica proveniente dos esgotos domésticos (GDF, 2012).

O lago Paranoá tem como afluentes principais o Riacho Fundo, Ribeirão do Gama, Ribeirão Torto e o Ribeirão Bananal, além do Ribeirão Cabeça de Veado. Ainda, o lago funciona como corpo receptor direto de duas Estações de Tratamento de Esgotos (ETE Norte e ETE

Sul), e indiretamente da ETE Riacho Fundo. Apresenta uma área superficial de 37,5 km², volume total de 428 x 106m³ e uma profundidade média de 12,42m. A vazão média afluente no lago é de 11,29 m³/s e efluente de 19,80 m³/s, sendo caracterizado por um tempo de retenção de 299 dias (Nunes et al., 2020). A batimetria do lago, obtida através do Instituto de Geociências da UnB (Pires and Ianniruberto, 2008) pode ser observado na Figura 4.3. Pode ainda ser caracterizado como monomítico em relação ao seu perfil de mistura vertical, por apresentar mistura completa uma vez ao ano, fato que usualmente ocorre nos meses de inverno (junho a agosto), pela diminuição na temperatura da superfície da água.

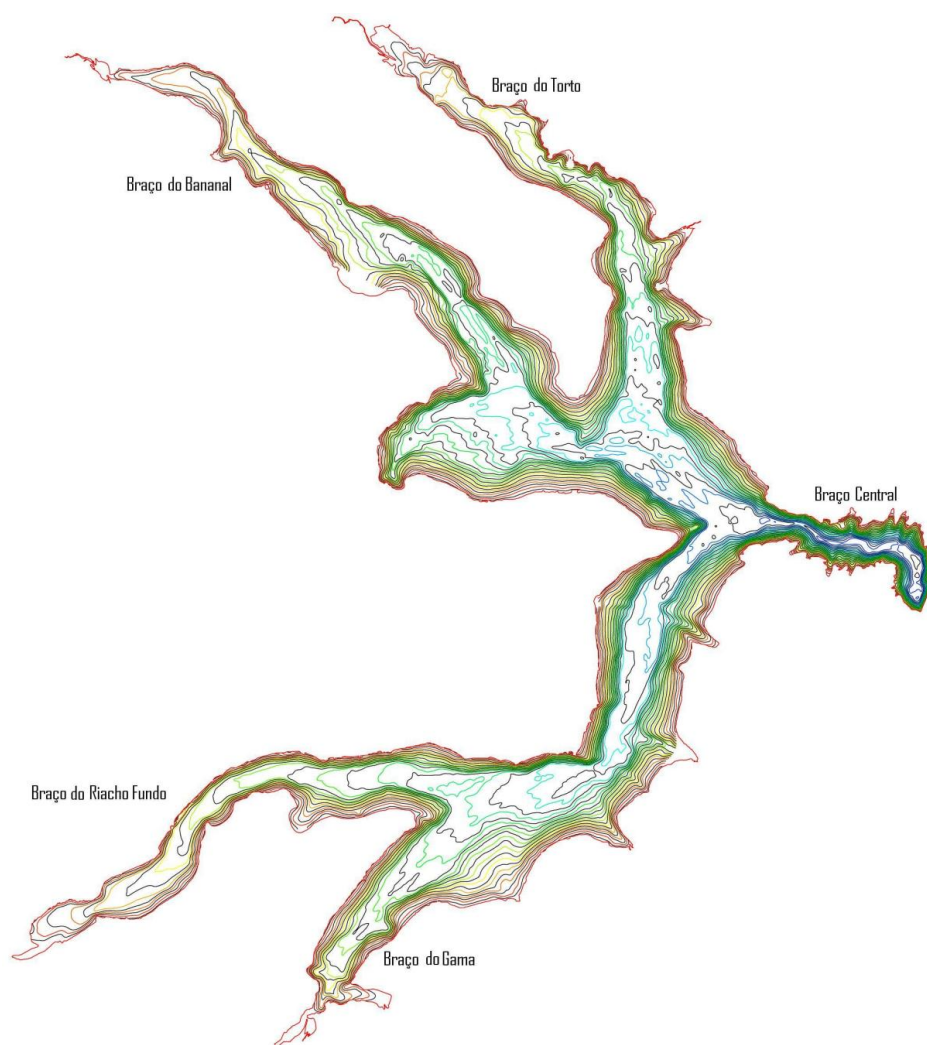


Figura 4.3: Batimetria do lago Paranoá com curvas de nível de 1 em 1 metro a partir da borda com cota 1000m (Pires and Ianniruberto, 2008).

Para a caracterização da qualidade da água dos corpos receptores de efluentes, a CAESB

utiliza o índice de qualidade de água (IQA), cujas categorias de classificação são: Ótima (80 ≤ IQA ≤ 100), Boa (52 ≤ IQA < 80), Aceitável (37 ≤ IQA < 52), Ruim (20 ≤ IQA < 37) e Péssima (0 ≤ IQA < 20). No Lago Paranoá, todos os corpos receptores foram classificados como "boa qualidade" ao longo do ano de 2012, à exceção das águas do córrego Riacho Fundo, após os lançamentos de esgoto tratado da ETE Riacho Fundo, classificado como aceitável para ruim em todas as campanhas (GDF, 2012).

A ADASA também conta com rede de monitoramento nas bacias hidrográficas, totalizando 47 estações. Na bacia do rio Paranoá são três estações (Tabela 4.1), além das estações no Lago Paranoá. Em análise da qualidade da água por esta base de dados, observou-se que os parâmetros nitrato, nitrito, nitrogênio amoniacal total, sólidos totais dissolvidos, OD e DBO_{5,20} apresentaram em todas as estações valores dentro dos limites estabelecidos para corpos d'água classe 1. O parâmetro coliformes termotolerantes foi o que mais apresentou valores médios acima dos limites estabelecidos para corpos d'água classe 3 (GDF, 2012).

Tabela 4.1: Localização das estações existentes de monitoramento dos sistemas fluviais na bacia do rio Paranoá/DF.

Local	Código	Estação	Latitude	Longitude
Rio Paranoá	60447700	Vicente Pires - montante	15°48'28"	48°00'24"
	60477800	Vicente Pires - jusante	15°51'27"	47°58'39"
	60478485	Gama - mont. Capetinga	15°56'26"	47°56'39"
Lago Paranoá		Riacho Fundo	15°51'04,81"	47°55'55,95"
		Gama	15°51'30,19"	47°52'26,88"
		Bananal	15°43'49,41"	47°53'39,14"
		Torto	15°42'25,33"	47°53'30,47"
		Barragem	15°47'59,40"	47°47'07,03"

Ainda em relação ao monitoramento dessas estações, foi calculado o Índice de Estado Trófico (IET) das águas superficiais das diferentes bacias, e em todas as estações da ADASA na bacia do Paranoá e no lago, a classificação do corpo hídrico foi de Ultraoligotrófico, ou seja, corpos d'água limpos, de produtividade muito baixa e concentrações insignificantes de nutrientes que não acarretam em prejuízos aos usos da água (GDF, 2012).

É importante mencionar as mudanças na ocupação e no regime de chuvas que o DF vem enfrentando nos últimos anos, fatores que são apontados como principais razões para

a crise hídrica de 2016-2018. O acumulado histórico de chuva média na região, que varia entre 1400 e 1600 mm/ano, apresentou valores menores que 1.400 mm/ano nos últimos anos, especialmente na região noroeste do DF, ou seja, na região que verte suas águas para o Reservatório do Descoberto, importante manancial de abastecimento do local. No ano hidrológico de 2015-2016, os índices pluviométricos atingiram valores de até 800mm/ano (Lima et al., 2018) .

Outro ponto importante é o crescimento populacional acelerado no Distrito Federal. No período de 2010 a 2017, a população aumentou 18,2% em relação ao censo populacional de 2010. Ainda, a velocidade de crescimento da expansão urbana supera a velocidade do crescimento populacional, indicando que a população vem ocupando novos espaços, em vez de adensar áreas já urbanizadas. Ainda, os últimos dados de ocupação informal no DF (DF, 2016) apontam um aumento também nesse aspecto, sendo que em 2018, o DF possuía 194,4 mil terrenos sem registro. Este último fator, como é sabido, impacta diretamente nos recursos hídricos, devido a captações, derivações e lançamentos de efluentes irregulares, que prejudicam a eficiência da infraestrutura de abastecimento de água existente e a qualidade dos recursos hídricos (Brandão et al., 2018).

Dentre as manobras realizadas pela Adasa no período da crise, ocorreu a já mencionada captação emergencial do Lago Paranoá, que passou a compor o Sistema Torto-Santa Maria que abastece treze áreas urbanas da região, além de transferir água para o Sistema Sobradinho-Planaltina e Sistema São Sebastião. O volume de captação foi definido em função do valor da outorga prévia do Lago Paranoá autorizado pela ANA (Agência Nacional de Águas), de 2800 L/s e conta com tratamento no próprio local por meio implantação de estação de tratamento de água compacta, com utilização de membranas de ultrafiltração (Mühlhofer and Vasconcelos, 2018).

Apesar da boa qualidade da água encontrada no Lago Paranoá, de acordo com a classificação tanto pelos critérios e dados da Caesb como da Adasa, o lago apresenta histórico de eutrofização, como já mencionado anteriormente (Seção 3.4), o que demandou, em décadas anteriores, uma série de manobras da Caesb e da CEB na operação da barragem, para

controle do florescimento de fitoplâncton, seja pela aplicação de algicidas pela primeira ou, apresentando melhores resultados, o rebaixamento da cota do Lago, que teve como intuito o amortecimento de ondas de cheias, mas que como consequência, contribuiu para a melhoria significativa da qualidade da água com redução das concentrações de fósforo e de biomassa de algas e cianobactérias, sendo essa prática realizada ocasionalmente a partir de 1998 (Elmoor-Loureiro, 2004).

Os recentes estudos que apontam a presença de espécies de cianobactérias que eram encontradas apenas no período antes dessas manobras, assim como alguns eventos de mortalidade de peixes no Lago e no rio Paranoá, à jusante da barragem, nos últimos anos, sugerem a necessidade de intensificação de monitoramento da qualidade da água, assim como da presença de cianotoxinas nesse corpo hídrico.

4.3 CARACTERIZAÇÃO DA BASE DE DADOS

A base de dados dos pontos monitorados pela Caesb foi fornecida pela companhia e consolidada por Nunes (2019). A partir dessa base, foi determinado o período de simulação, assim como os cenários a serem inseridos no algoritmo de calibração, explanados na seção 4.6 mais adiante. As variáveis monitoradas são Temperatura (°C), transparência (cm), cor (uH), turbidez, (uT), Sólidos Suspensos (mg/L), Sólidos Dissolvidos Totais (mg/L), pH, Cloreto (mg/L), Ferro Total (mg/L), Oxigênio Dissolvido (OD), DQO/OC (Demanda Química de Oxigênio/Oxigênio Consumido, análise realizada utilizando permanganato de potássio para extração de materiais oxidáveis de baixa concentração e utilizado quando não se tinha o valor de DQO), Fósforo Total (mg/L), NH₃, Nitrogênio Total (mg/L), Clorofila-a (mg/L), Fitoplâncton (mg/L) e a mesma variável em ind/L.

Os dados do ponto C foram utilizados para calibração do modelo, por ser o único ponto em que há dados monitorados em mais de uma profundidade. De modo geral, o período de dados fornecido é de 1976 a 2018, no entanto, devido a falhas ao longo dos anos, foi analisado e identificado o período de dados disponíveis por variável para identificação do maior período contínuo sem falhas em comum para as variáveis consideradas. A Figura 4.4

mostra o resultado desta análise para o ponto C, na profundidade de 1m.

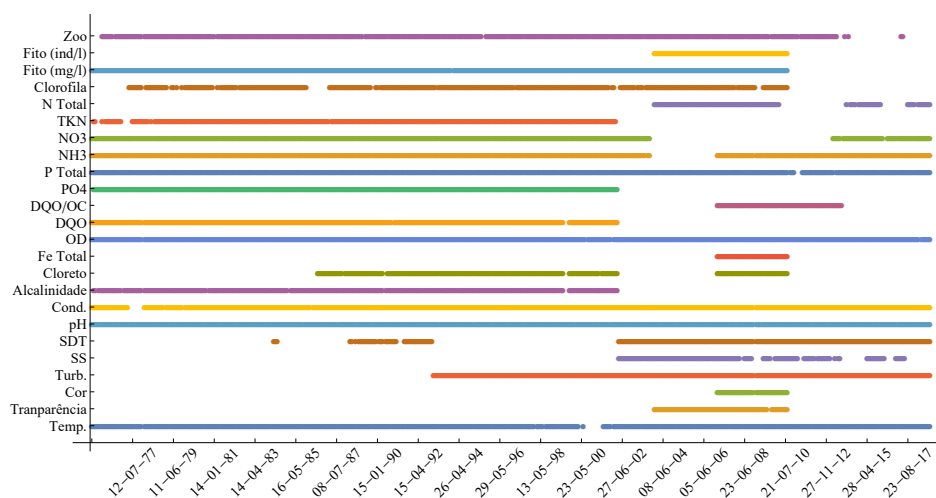


Figura 4.4: Extensão dos dados disponíveis de qualidade de água do ponto C (estação central da CAESB) do Lago Paranoá/DF, na profundidade de 1m.

Por mais que nos anos iniciais do monitoramento, haja mais variáveis sendo monitoradas e com menos falhas durante este período, pelo histórico do lago e diferentes períodos característicos de qualidade ao longo das décadas, tinha-se o intuito de analisar períodos mais recentes e por conseguinte, mais representativos da condição atual do Lago Paranoá. Por isso, o período de dados escolhido para simulação neste trabalho foram os anos de 2006 até o final do ano de 2010, totalizando 5 anos de dados.

Na etapa de calibração foram utilizados apenas os anos de 2006 a 2008 para simplificação (pois a rotina computacional de calibração levava cerca de cinco dias para rodar todas as iterações), e os cinco anos foram utilizados na etapa de simulação. Vale salientar que os períodos de dados são iguais para as demais profundidades nesse ponto, e por isso, foi demonstrado na figura apenas a profundidade de 1m.

Em relação ao fósforo, a única variável sobre a qual se tem dados é o Fósforo Total, que apesar de não ser uma variável de estado no CE-QUAL-W2 (e sim o PO_4), é possível simulá-lo a partir do módulo "Derived Constituents", que são os constituintes derivados dos principais. Apesar de se ter dados sobre outras variáveis relacionadas ao nitrogênio, a Amônia (NH_4) é a variável com maior tempo contínuo de dados, e por isso, foi utilizada para avaliação da simulação de nitrogênio no lago.

Isto também ocorreu com a simulação de fitoplâncton, visto que a variável de estado no modelo “Algas” é dada em peso seco de matéria orgânica em miligramas, e os dados observados eram de concentração de fitoplâncton em mg/L. Por isso, utilizou-se a variável derivada “Algas Totais (Total algae)” em g/m^3 para simulação.

Assim, as variáveis Algas Totais (aqui representando toda a comunidade fitoplanctônica), Oxigênio Dissolvido, Fósforo Total e Amônia foram as variáveis escolhidas para simulação neste trabalho.

4.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Nas tabelas 3.2-3.5 apresentadas na Seção 3.3.2, foram apresentados os parâmetros usualmente calibrados na literatura para os módulos de nutrientes e fitoplâncton, assim como características dos valores encontrados. Para confirmação desse levantamento, foi feita uma análise de sensibilidade do modelo, tanto aos parâmetros levantados na tabela, como aos não mencionados, onde adotou-se os valores extremos (mínimos e máximos) do intervalo sugerido no manual do modelo e observou-se visualmente os efeitos na simulação.

As variáveis analisadas apresentaram, de fato, maior sensibilidade aos parâmetros levantados, enquanto para os demais, para esse lago, pouca ou nenhuma variação nos resultados foi observada. Como exceção, pode-se mencionar o parâmetro de Excreção de Algas (AE), que teve influência quase nula na simulação de fitoplâncton, e o Fósforo Total, que se mostrou sensível também ao parâmetro da taxa de sedimentação de compostos orgânicos (POMS), o que não tinha sido encontrado nos parâmetros levantados.

O resultado dessa análise pode ser visto nas Figuras 4.5, 4.6 e 4.7. Nas duas primeiras são apresentadas a sensibilidade do Fitoplâncton aos oito parâmetros levantados na literatura, e na última, a sensibilidade das variáveis relacionadas a nutrientes (Fósforo Total, Amônia e Nitrito-Nitrato) aos parâmetros mencionados.

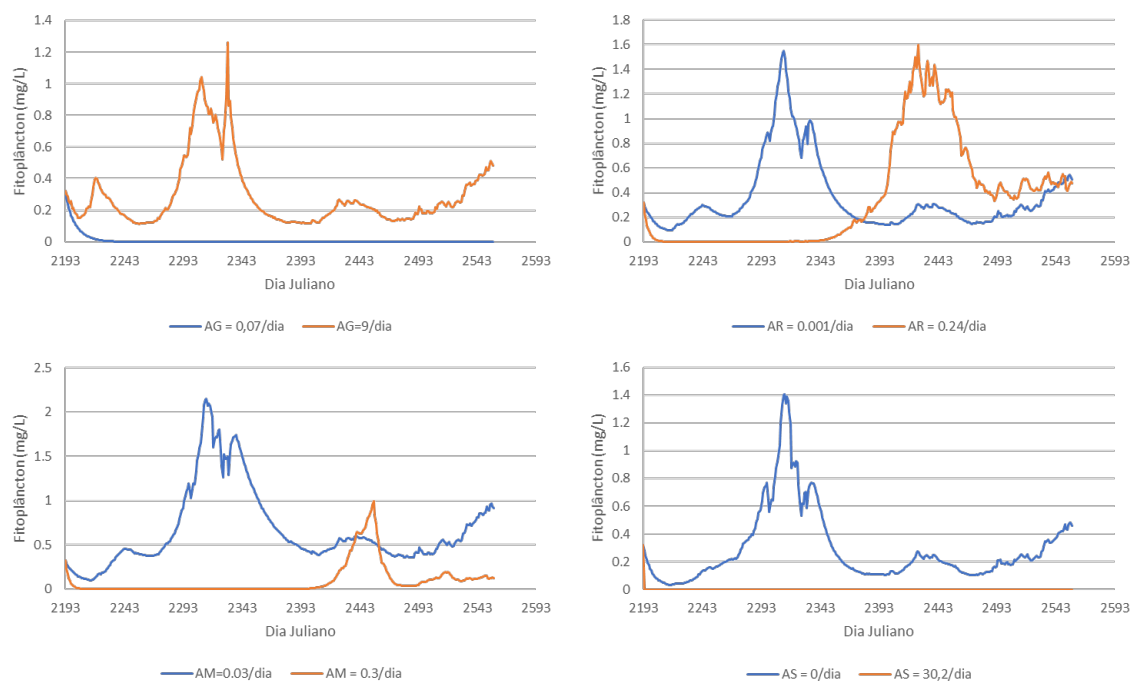


Figura 4.5: Simulação de Fitoplâncton com variação dos parâmetros de crescimento (AG), respiração (AR), mortalidade (AM) e sedimentação (AS), assumindo os extremos do intervalo sugerido pelo modelo.

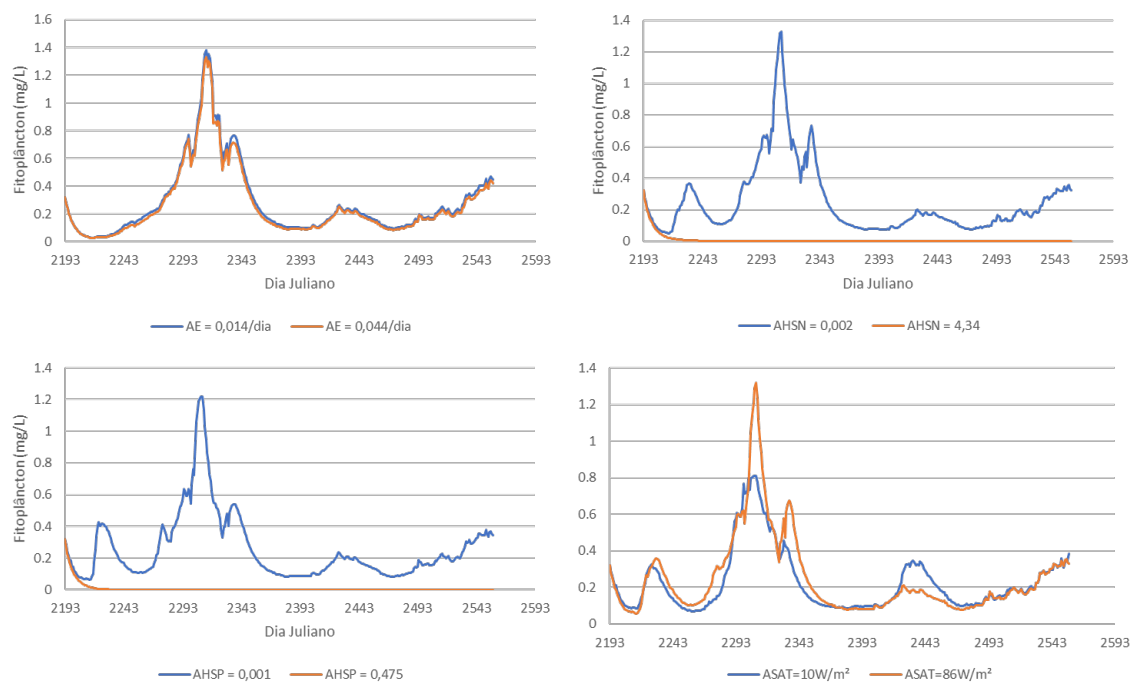


Figura 4.6: Simulação de Fitoplâncton com variação dos parâmetros de excreção (AE), constante de meia saturação por nitrogênio (AHSN), constante de meia saturação por fósforo (AHSP) e saturação por luz (ASAT), assumindo os extremos do intervalo sugerido pelo modelo.

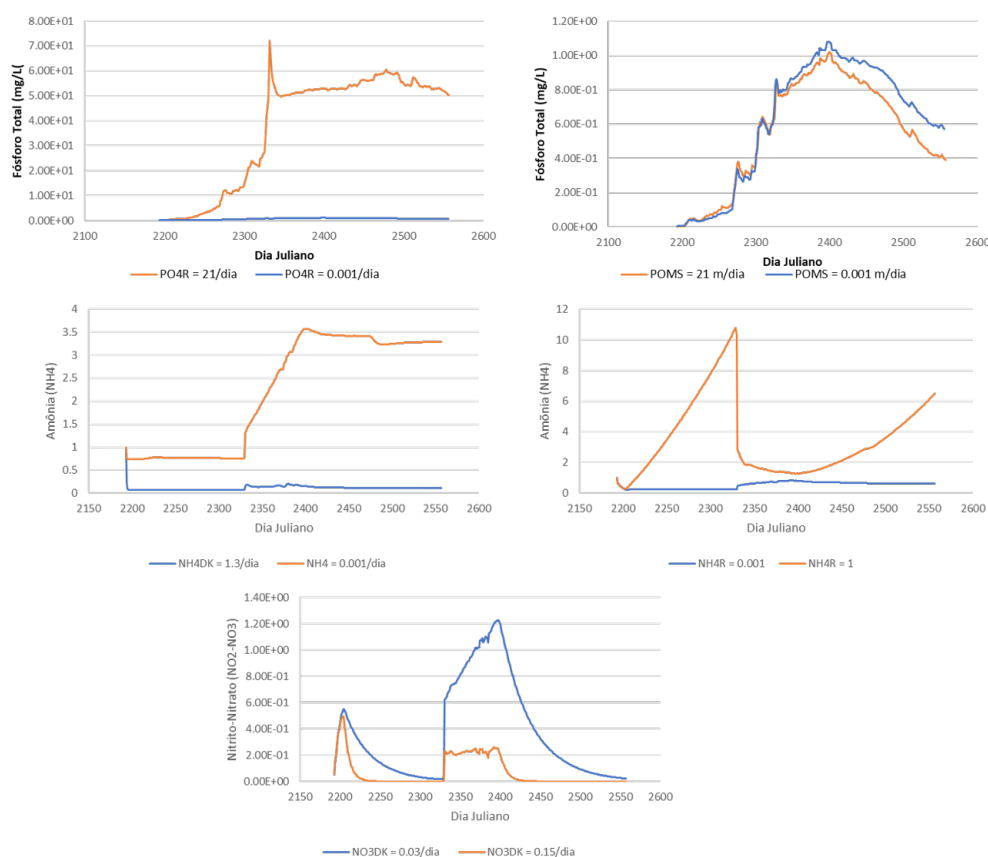


Figura 4.7: Simulação de Fósforo Total, Amônia e Nitrito-Nitrato com variação dos parâmetros da taxa de liberação de ortofosfato pelo sedimento (PO4R), sedimentação de matéria orgânica (POMS), taxa de decaimento da amônia (NH4DK), taxa de liberação da amônia pelo sedimento (NH4R), e taxa de decaimento do nitrato (NH4DK), assumindo os extremos do intervalo sugerido pelo modelo.

4.5 PREPARAÇÃO DE ARQUIVOS DE ENTRADA E CONDIÇÕES INICIAIS

O processo de construção dos arquivos de dados meteorológicos, condições iniciais e condições de contorno, assim como o procedimento de preenchimento de falhas para construção desses arquivos foi realizado por Liporoni (2012) e posteriormente consolidado por Nunes (2019), e está explanado em detalhes em seus respectivos trabalhos. Além disso, a maneira como a geometria do lago foi inserida no modelo, a partir dos dados batimétricos também pode ser encontrada no trabalho citado. Nas próximas seções, serão descritas essas etapas de maneira breve.

4.5.1 Geometria da área de estudo e características do corpo d'água

O CE-QUAL-W2 trabalha com a representação do corpo d'água por diferenças finitas, e com a possibilidade da segmentação da área de estudo em qualquer número de braços ou diferentes corpos d'água. A diferença entre essas duas formas reside no fato de que, com mais de um corpo d'água, o programa permite a entrada de mais de um arquivo de dados meteorológicos, e portanto, foi a forma escolhida para representação do lago Paranoá no modelo.

Na Figura 4.8, está a representação da segmentação da área de estudo nos cinco corpos d'água, correspondendo à cada braço e à parte central do lago. Como citado, essa representação foi feita a partir dos dados batimétricos do lago, obtidos junto ao Instituto de Geociências da UnB (Liporoni, 2012). A definição dos tamanhos dos segmentos de cada braço foi feita de acordo com o recomendado pelo manual do modelo, tentando-se manter a relação altura da camada/comprimento do segmento o mais próximo possível da declividade do fundo de cada braço.

Além disso, o lago é discretizado também na direção vertical, representado na Figura 4.9. Essas camadas foram definidas com uma altura de 2 metros, levando-se em consideração a profundidade máxima do lago e a resolução de simulação desejada.

Como pode-se observar, o corpo d'água 1 (Central) é dividido longitudinalmente em 15 segmentos e em 30 camadas de profundidade, com o número dentro da célula na figura correspondendo à largura da seção naquela profundidade; o corpo d'água 2 (Torto), em 11 segmentos longitudinais e 22 camadas de profundidade; o corpo d'água 3 (Bananal), em 11 segmentos longitudinais e 19 verticais; o 4 (Riacho Fundo), em 14 longitudinais e 28 verticais; e, por fim, o corpo d'água 5 (Gama), em 9 segmentos longitudinais e 18 camadas verticais.

4.5.2 Estruturas Hidráulicas

O modelo permite que o usuário insira uma série de estruturas hidráulicas para simulação, como: bombas, vertedouros, tubulações, comportas, entre outros. Nesse caso, foi inserido

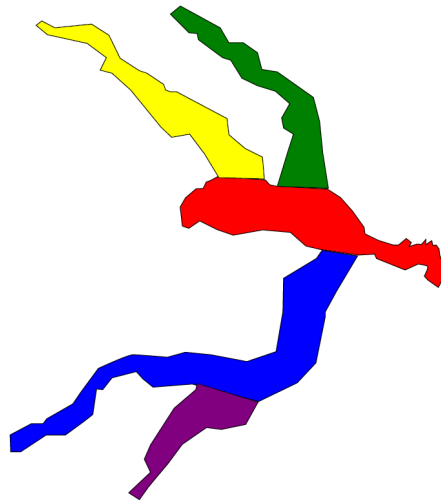


Figura 4.8: Discretização do lago nos 5 corpos d'água para inserção no modelo.

no modelo apenas o vertedouro, onde são inseridas as camadas de topo e de fundo, limites para a retirada de água, o tipo do vertedouro (o modelo aceita do tipo “linha” ou “ponto”. O primeiro representa estruturas cuja relação com a largura da barragem seja maior que 1/10, e o segundo, quando menor que 1/10), e sua cota.

Para esse estudo foi determinada uma estrutura superior do tipo “linha” com 30m de largura, na cota 996.75, e camadas 2 e 12 como limites verticais, e uma estrutura inferior do tipo “ponto”, de cota 986.5, e camadas 13 e 16 como limites verticais. Essas dimensões foram baseadas nas plantas digitalizadas da barragem do lago Paranoá disponibilizadas pela Companhia Energética de Brasília, CEB Geração (Liporoni, 2012).

4.5.3 Dados meteorológicos

As variáveis necessárias no arquivo de dados meteorológicos são a temperatura do ar, temperatura do ponto de orvalho, velocidade do vento, ângulo do vetor de velocidade do vento em radianos, cobertura de nuvens e radiação solar.

Parte dos dados foram obtidos a partir da estação meteorológica A001, do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET), distante cerca de 12km da zona central do lago. Dessa estação, foram obtidos os dados de temperatura do ar, ponto de orvalho, precipitação e cobertura por nuvens.

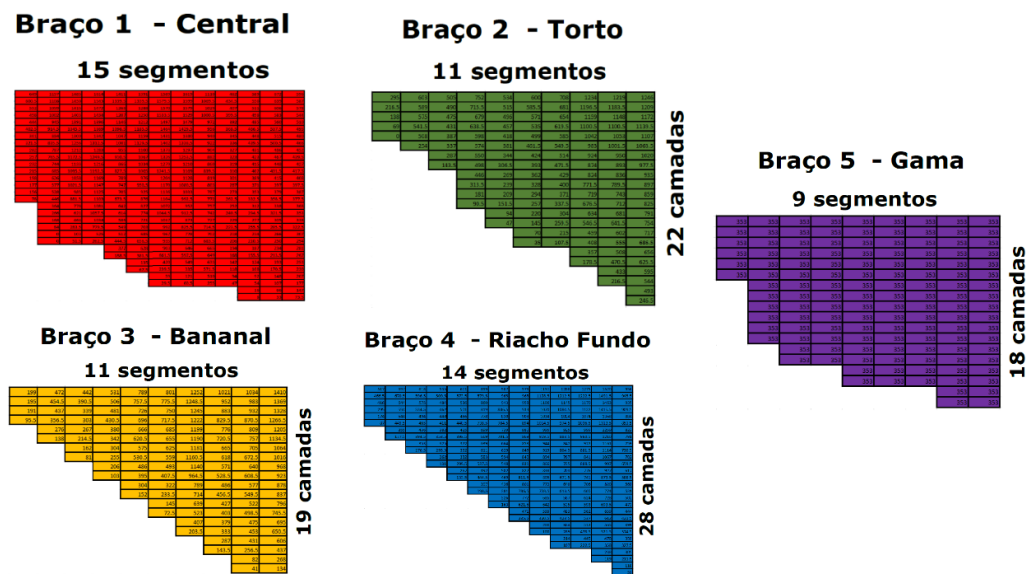


Figura 4.9: Discretização longitudinal e vertical de cada corpo d'água.

Os demais dados foram obtidos através da estação do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) localizada na Embrapa Cerrados, distante cerca de 23km da zona central do Lago. Os dados dessa estação estavam em escala de minutos, e por isso foram calculadas médias para obtenção de dados diários.

A distância destas estações para a área de estudo já foi apontada por Liporoni (2012) como uma possível limitação do trabalho, podendo ter efeitos negativos na simulação. O trabalho de Nunes (2018) conta com a instalação de anemômetros ao redor do lago para obtenção dos dados relacionados à velocidade do vento, o que, apesar de não prover todos os dados meteorológicos necessários ao modelo, reduziria o efeito da distância em algumas das variáveis. No entanto, esses dados ainda não estavam disponíveis à época deste trabalho. Assim, na ausência de outros dados disponíveis, as mesmas estações foram utilizadas.

A localização das duas estações está demonstrada na Figura 4.11, em azul.

4.5.4 Condições iniciais

Como condições iniciais, o modelo recebe a temperatura inicial (T2I) que pode ser um valor único, um perfil único para todos os segmentos, ou um perfil variado para cada segmento. No caso desses dois últimos, um arquivo em formato *csv* precisa ser fornecido ao

modelo. Neste trabalho, foi utilizado um perfil único para todos os segmentos, construído a partir de dados observados de um período de estratificação do lago.

Caso o módulo de qualidade esteja sendo simulado, concentrações iniciais dos diferentes constituintes são adicionadas da mesma forma, no mesmo arquivo que as temperaturas iniciais. Da mesma forma que o perfil de temperatura, o perfil de qualidade para Sólidos Dissolvidos Totais, Turbidez, PO_4 , NH_4 , NO_2 - NO_3 , e OD também foi adicionado.

Para as demais variáveis simuladas no módulo de qualidade sobre as quais não se dispunham dados (LDM, RDM, LPOM, RPOM, CBOD e fitoplâncton), foram arbitrados valores iniciais apenas para que fosse possível realizar a simulação (o modelo não simula essas variáveis caso a condição inicial seja igual a 0).

4.5.5 Coeficientes hidráulicos

Como já explanado, neste trabalho foi realizada a calibração e simulação do módulo de qualidade da água, como uma continuação de trabalhos já realizados no PTARH (Liporoni, 2012; Nunes, 2018), que tiveram como foco a simulação hidrodinâmica.

Esse módulo, portanto, já havia sido calibrado, também com o auxílio de rotinas de calibração, e resultados satisfatórios foram encontrados. Descrição detalhada sobre esse processo e seus resultados podem ser encontrados em Nunes (2020). Os valores dos parâmetros obtidos para esse módulo estão dispostos na Tabela 4.7.

Os perfis de temperatura para o ano de 2008 (escolhido aleatoriamente) podem ser observados na Figura 4.7. Os demais anos podem ser encontrados no Apêndice B.

4.5.6 Condições de contorno

As condições de contorno do modelo podem ser, basicamente, de quatro tipos: de entrada no sistema, de saída do sistema, de carga aportada ou de superfície. Neste estudo, apenas as duas primeiras foram utilizadas como entrada no modelo, construídas conforme descrito nas próximas seções.

Tabela 4.2: Parâmetros *default* e calibrados do módulo hidrodinâmico por Nunes (2018).

Parâmetro	Default	Valor calibrado
Viscosidade Turbulenta Horizontal (AX)	1,0	0,51 m/s
Difusividade Turbulenta Horizontal (DX)	1,0	0,47 m/s
Coefficiente de troca de calor do sedimento (CBHE)	0,3	0,33 W/m ² /s
Temperatura do sedimento (TSED)	-	20,11 °
Fração da radiação solar incidente absorvida na superfície da água (BETA)	0,45	0,65
Coefficiente de extinção da água (EXH2O)	0,25 ou 0,45	0,14 m ⁻¹
Coefficiente "a" na fórmula da velocidade do vento (AFW)	9,2	10,9 Wm ⁻² mmHg ⁻¹
Coefficiente "b" na fórmula da velocidade do vento (BFW)	0,46	0,87 Wm ⁻² mm Hg ⁻¹ (ms ⁻¹) ^{-c f w}
Coefficiente "c" na fórmula da velocidade do vento (CFW)	2,0	0,58
Coefficiente de abrigo do vento (WSC)	-	1,95
Coefficiente de rugosidade (FRIC)	-	44,1

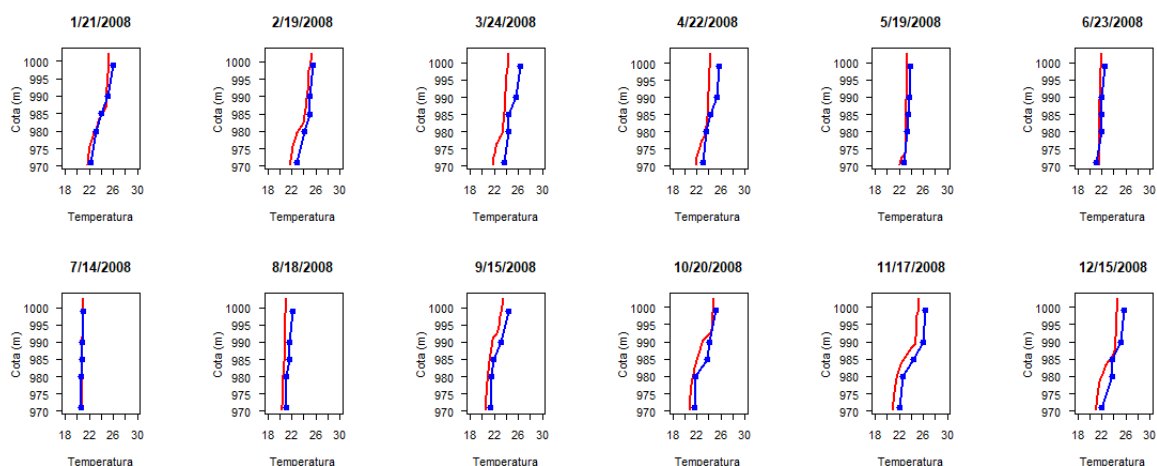


Figura 4.10: Perfil de temperatura simulado (linha vermelha) e dados observados (linha azul) para o ano de 2008 (Nunes, 2018).

Condições de contorno de entrada

- **Vazão:** é necessário inserir vazões de entrada para cada corpo hídrico considerado (nesse caso, para todos os 5), vazões distribuídas e vazões dos tributários. Neste trabalho, para os diferentes braços foram construídos arquivos de entrada a partir dos dados de vazões das estações da Caesb em cada braço do lago (Torto - 60477400, Bananal - 60477600, Riacho Fundo - 6048400, Gama - 60478500, Cabeça de Veado - 60478600)

dispostas na Figura 4.11 em vermelho com seus respectivos códigos.

Para os dados de vazões distribuídas, foram feitas estimativas a partir do coeficiente de escoamento superficial de cada bacia de drenagem com escoamento direto no reservatório, e então os dados de precipitação obtidos através da estação A001 do INMET foram utilizados para a construção desse arquivo.

Como tributários, foram inseridos os dados das duas estações de tratamento de esgoto, ETE Norte e ETE Sul, e os dados de vazão do córrego Cabeça de Veado, todos obtidos também da Caesb. Todos os dados até aqui apresentados nesta seção apresentavam frequência diária.

- **Constituintes de qualidade e temperatura:** Para os constituintes de qualidade, procedimento parecido foi utilizado. Os constituintes inseridos nesses arquivos foram Sólidos Dissolvidos Totais, Ortofosfato, Amônia, Nitrito-Nitrato e Oxigênio Dissolvido. Para os dados de entrada de cada braço, foram utilizados os dados mensais de qualidade dos postos nos braços (representados em verde na Figura 4.11), e para o corpo central, foi considerado que para todos os constituintes de entrada, a concentração era igual a zero.

Nesses arquivos, o PO_4 foi medido somente até março de 2002, houve um período sem medições de PO_4 ou fósforo total, e só após 2004 houve medições de fósforo total. No período em que não se tinha dados, assumiu-se o valor médio dos dados (0,002 mg/L) para preenchimento da falha. Após 2004, considerou-se que o PO_4 correspondia a 25% do valor medido de fósforo total, baseado também no valor médio dos dados.

Os dados de qualidade para os demais arquivos (concentrações distribuída e de tributários) foram construídos da mesma forma que os da vazão distribuída e da vazão dos tributários, utilizando também a mesma fonte de dados. Para os parâmetros de qualidade que caracterizam as vazões distribuídas, os parâmetros foram obtidos a partir de estudos com caracterização pontuais, devido à dificuldade de se obter uma caracterização precisa da qualidade das águas de drenagem urbana, o que também já foi apontado

por Liporoni (2012) como uma limitação do estudo.

Para as concentrações de tributários, os dados de qualidade das duas ETEs foram utilizados, os quais têm frequência mensal. Como o oxigênio dissolvido não é medido na saída das estações, para esses arquivos, essa variável não foi inserida.

As séries temporais em forma gráfica para os diferentes constituintes e tipos de condição de contorno (dos corpos hídricos, distribuídas e dos tributários) podem ser encontradas no Apêndice C.

Desses postos também foram extraídos os dados de temperatura. Vale observar, no entanto, que no modelo, esses dados são inseridos separadamente aos dados de qualidade.

Condições de contorno de saída

- **Vazão e cota:** Os dados de saída de vazão e de cota do lago foram inseridos apenas do corpo central, por ser onde está localizada a saída do sistema, e os dados utilizados foram obtidos através dos dados disponibilizados pela CEB Geração, que além de monitorar a cota do lago, também dispõe dos dados de vazões vertidas e turbinadas. Todos esses dados apresentavam frequência diária.
- **Constituintes e temperatura:** Para os arquivos de constituintes e temperatura para a condição de contorno de saída, foi utilizada a estação da Caesb localizada no Rio Paranoá, à jusante da barragem, também apresentado na Figura 4.11, em verde.

4.6 CONFIGURAÇÃO DO ALGORITMO E CENÁRIOS DE CALIBRAÇÃO

No módulo principal do algoritmo desenvolvido (Barros, 2018) são definidas algumas variáveis importantes, como: i) o número de repetições de simulação a serem realizadas; ii) o nome e formato do arquivo de saída, que contém os valores assumidos pela variável de decisão e o valor da função objetivo a cada iteração; iii) o número de complexos evolutivos

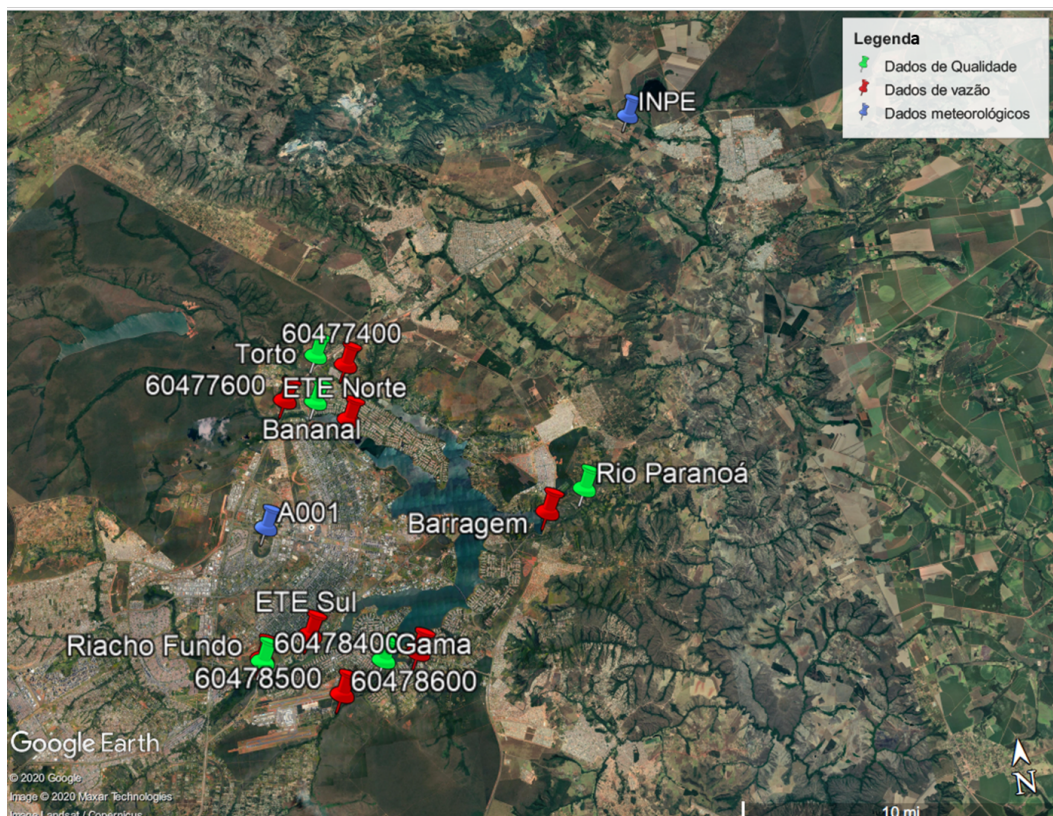


Figura 4.11: Postos utilizados para construção dos arquivos de condições de contorno do modelo.

que serão formados; iv) o número de ciclos de redistribuição cuja função objetivo precisa ser alterada por uma dada porcentagem antes da otimização ser terminada; v) a porcentagem de alteração; vi) o nível de convergência para um conjunto de parâmetros; e vii) a definição da função objetivo. As principais funções do algoritmo utilizado podem ser encontradas no Apêndice D deste trabalho.

Nesse caso, foram adotadas 150 repetições no algoritmo, cuja saída é um banco de dados em formato *.csv*, foi escolhido 12 complexos evolutivos, 100 ciclos de redistribuição com uma diferença de porcentagem de 0,001 para que o critério de parada seja atendido, um nível de convergência de 0,01 e a função objetivo escolhida foi a Nash-Sutcliffe, detalhada na próxima seção.

Dentro do módulo principal, tem-se o arquivo chamado *spotpy*, que realiza a escrita do arquivo *w2-con* (arquivo de texto de leitura pelo CE-QUAL-W2 com toda a configuração do modelo) a cada iteração. Nele, são inseridos o arquivo com dados observados para com-

paração pelo algoritmo, é determinado o constituinte que irá compor a função objetivo, as variáveis de decisão que serão calibradas, acrescentando um intervalo de valores mínimos, máximos e valor inicial.

A rotina de calibração foi executada sob quatro diferentes cenários, em que se alterava a variável objetivo para otimização, assim como as variáveis de decisão que eram simuladas em cada um deles. Assim, foram calibrados (em ordem cronológica de simulação) os seguintes cenários:

- **Cenário I:** Teve o objetivo de otimizar a calibração do **Oxigênio Dissolvido (DO)**, alterando as variáveis **Demanda de Oxigênio pelo Sedimento (SOD)**, **Temperatura mais baixa para decaimento pelo sedimento (SODT1)** e **Temperatura mais alta para decaimento pelo sedimento (SODT2)**. Os intervalos de calibração e estimativa inicial foram inseridos de acordo com o manual do modelo. A estimativa inicial para a temperatura foi inserida de acordo com observações de temperatura usuais locais. Estes valores estão dispostos na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Variáveis calibradas no cenário I, assim como seus intervalos de calibração e estimativa inicial.

Variável de decisão calibrado	Valor mínimo	Valor máximo	Estimativa inicial
SOD	0.1 gO ₂ /m ³ /dia	5.5 gO ₂ /m ³ /dia	0.1 gO ₂ /m ³ /dia
SODT1	5 ° C	20 ° C	15 ° C
SODT2	20 ° C	35 ° C	25 ° C

- **Cenário II:** Teve o objetivo de otimizar o **Fósforo Total**, calibrando as variáveis de decisão **Desprendimento de fósforo pelo sedimento (PO4R)** e a variável referente à sedimentação da Matéria Orgânica (POMS). Os intervalos de variação e estimativa inicial inseridos no algoritmo correspondem aos valores mínimos, máximos e médios, respectivamente, encontrados na tabela 3.4. Para a taxa de sedimentação, foi utilizada a sugerida pelo modelo (0,001 - 20, e valor inicial de 0,1).
- **Cenário III:** Teve o objetivo de otimizar a calibração **amônia (NH₄)**, alterando as variáveis de decisão **Decaimento de Amônia (NH4DK)**, **Decaimento de Nitrato**

(NO₃DK), e a Taxa de Liberação de Amônia pelo Sedimento (NH₄R), os valores mínimos, máximos e valor de melhor estimativa (foi considerada a média dos valores encontrados) podem ser encontrados na Tabela 3.4.

- **Cenário IV:** Teve o objetivo de otimizar a calibração de **Algas** (aqui representando toda a comunidade fitoplanctônica), alterando as variáveis de decisão descritas na Tabela 3.5, sendo o intervalo de variação e estimativa inicial, os valores mínimos, máximos e médios, respectivamente.

4.6.1 Métricas para avaliação da simulação

Algumas métricas foram utilizadas neste trabalho para avaliar a simulação. No entanto, a métrica escolhida como função objetivo no modelo foi o coeficiente de Nash-Sutcliffe (NSE), por ser a métrica também utilizada no trabalho de Barros (2018). O NSE é uma métrica originalmente criada para análises de modelos hidrológicos, cujo intervalo de variação vai de menos infinito ($-\infty$) a 1. Sua principal vantagem em relação ao coeficiente de correlação, por exemplo, é que o coeficiente de correlação assume que o modelo testado não apresenta viés, ou seja, que a soma dos erros é igual a zero.

No NSE, caso um modelo linear não tenha viés, seu valor estará no intervalo entre 0 e 1. Um valor de NSE igual a 1 demonstraria um ajuste perfeito entre os dados simulados e observados, como pode ser demonstrado na equação 4.1. Um valor negativo usualmente demonstra viés no modelo, embora já tenha sido observado que em modelos não lineares, frequentemente são encontrados valores negativos de NSE (McCuen et al., 2006).

O NSE pode ser calculado através da equação:

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{n=1}^N (O_n - S_n)^2}{\sum_{n=1}^N (O_n - \bar{O})^2} \quad (4.1)$$

Na qual N é o número total de dados, O_n é o n ésimo dado observado, S_n o n ésimo dado simulado, e \bar{O} , a média dos dados observados. O denominador da equação, em termos

estatísticos, indica a variação total dos valores observados em relação à média. Já o numerador, por sua vez, é a diferença entre o valor simulado e o medido, indicando assim a variação dos dados que não foram explicados pelo modelo (McCuen et al., 2006).

Para a calibração, foi criada uma série com as cinco diferentes profundidades (1m, 5m, 10m, 15m e 1m do fundo), e o NSE desta série foi utilizado como a função objetivo. Ainda assim, o NSE das cinco profundidades foram calculados individualmente para posterior avaliação.

Além do NSE, foram calculados o Erro Médio Absoluto (EMA) e a Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE) para avaliação dos cenários. São dados pelas equações, respectivamente:

$$EMA = \frac{\sum_{n=1}^N |O_n - S_n|}{N} \quad (4.2)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N |O_n - S_n|}{N}} \quad (4.3)$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados das simulações para todas as variáveis, sendo abordado primeiramente os resultados gerais referentes a todas as simulações, e em seguida são discutidos mais detalhadamente os resultados para as variáveis Oxigênio Dissolvido (Seção 5.1), Fósforo Total e Nitrogênio (Seção 5.2), e Fitoplâncton (Seção 5.3). Por fim, é feita uma avaliação da performance do algoritmo de calibração e algumas de suas limitações (Seção 5.4). Os melhores valores das variáveis de decisão encontrados para cada cenário estão dispostos na Tabela 5.1, assim como o valor de NSE encontrado para todo o cenário, ou seja, o valor do NSE para as cinco profundidades analisadas como uma única série de dados.

Vê-se que a calibração das variáveis relacionadas ao Oxigênio Dissolvido (cenário I) levou à melhor simulação (NSE = -0,06), apesar de ainda não ser um resultado desejado, seguidos das relacionadas ao Fósforo Total (cenário II) e de Algas (fitoplâncton) (cenário IV), com valores de NSE de -0,2 e -0,42, respectivamente. A pior calibração foi a de Nitrogênio Amoniacal (cenário III) com valor de NSE = -0,81.

Os valores consistentemente negativos em todos os cenários apontam à presença de viés na calibração, podendo ser causado por diferenças na magnitude ou deslocamento no tempo entre os dados observados e simulados. McCuen et al. (2006) discutem que a sensibilidade desta métrica aos fatores aqui levantados, além de outros, como o tamanho da amostra e a presença de *outliers*, tornam o NSE uma métrica com muitas limitações, devendo ser usado com cautela e acompanhado de outras análises, não realizadas neste trabalho.

5.1 OXIGÊNIO DISSOLVIDO

Na Figura 5.1, tem-se a apresentação dos perfis observados e simulados de oxigênio dissolvido para a estação de monitoramento "Ponto C" do lago Paranoá (dezembro de 2007 a novembro de 2008). A escolha do período para a apresentação dos resultados foi realizada de maneira arbitrária, a fim de apresentar o comportamento padrão de resposta do modelo

Tabela 5.1: Parâmetros calibrados em cada cenário, valores *default* e valores encontrados após a calibração, assim como os NSE de cada cenário.

Cenário	Parâmetro	Unidade	Default	Valor inicial	Valor calibrado	NSE
I	SOD	g/m ² /dia	1,0	1,0	5,39	-0,06
	SODT1	°C	4,0	4,0	7,42	
	SODT2	°C	25,0	25,0	21,76	
II	PO4R	g/m ² /dia	0,001	0,01	0,006	-0,2
	POMS	m/dia	0,1	0,1	9,74	
	SSS	m/dia	1,0	1,0	31,44	
III	NO3DK	/dia	0,03	0,14	0,42	-0,81
	NH4DK	/dia	0,12	0,14	0,003	
	NO3S	/dia	0,001	0,001	0,003	
	NH4R	g NH ₄ -N/m ² /dia	0,001	0,05	0,08	
IV	AR	/dia	0,04	0,04	0,05	-0,42
	AG	/dia	2,0	2,05	0,90	
	AM	/dia	0,1	0,07	0,015	
	AS	/dia	0,1	0,09	0,20	
	AHSN	-	0,014	0,03	0,014	
	AHSP	-	0,003	0,014	0,05	
	ASAT	W/m ²	100	122,5	252,1	

calibrado quando comparado aos dados observados na coluna d'água. Na imagem, a linha vermelha representa os valores simulados, e a linha azul, os dados observados. A simulação para os demais anos pode ser encontrada no Apêndice E deste trabalho.

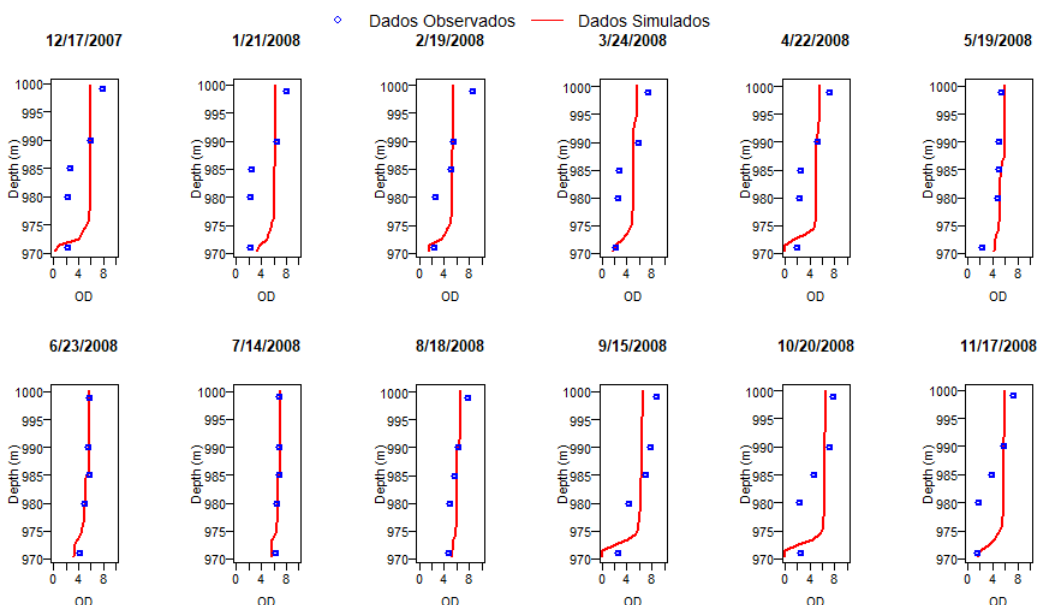


Figura 5.1: Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2008.

Como pode-se observar, o modelo simulou com precisão os períodos de mistura completa do lago, que como já citado, por ser um lago considerado monomítico, mistura completamente uma vez ao longo do ano. Na Figura 5.1, é possível observar a maior aderência entre o perfil simulado e os dados amostrados durante os períodos de mistura completa da coluna d'água (maio a agosto). No entanto, o modelo não conseguiu apresentar o mesmo nível de representação do sistema nos meses em que o ambiente se encontra estratificado (dezembro a abril, setembro a novembro).

As principais discrepâncias na simulação, no entanto, ocorrem no período de estratificação do lago. Os dados observados apontam que a maior variação da oxiclina ocorre um pouco abaixo dos 10m de profundidade, quando a concentração de oxigênio decresce rapidamente e por volta dos 20m, o valor mínimo de oxigênio dissolvido é atingido e se mantém assim até a camada de fundo (aproximadamente 3 mg/L). O modelo, no entanto, simulou a coluna d'água oxigenada aproximadamente até os 25m de profundidade, quando decresce rapidamente e simula com frequência períodos de anoxia na última camada.

Para melhor entendimento do processo de simulação do modelo, foram analisados os fluxos componentes do OD, já apresentados na Figura 3.5 na Seção 3.3.1. O modelo apresenta os fluxos como série temporal na frequência desejada, mas aqui, somou-se os valores dos fluxos para todo o período, e os dispomos em gráfico de barras (Figura 5.2 (a-e)) para demonstrar os fluxos totais predominantes em todo o processo. Os fluxos demonstrados na figura são os fluxos de produção e respiração pelo fitoplâncton (DOAP e DOAR), de decaimento por matéria orgânica particulada (DOPOM), por matéria orgânica dissolvida (DODOM), consumo por nitrificação (DONITR), decaimento por DBO (CBOD), fluxo de reaeração (DOREAR) e o consumo por sedimento (DOSOD).

Na figura, o segundo eixo y foi acrescentado devido à diferença em ordem de grandeza dos fluxos de DOREAR e DOSOD em relação aos demais, representados em barras azuis nos gráficos. Vale lembrar que os únicos fluxos positivos no processo, ou de fonte de oxigênio, são o DOAP e DOREAR. Todos os demais são responsáveis por consumo de oxigênio na coluna d'água.

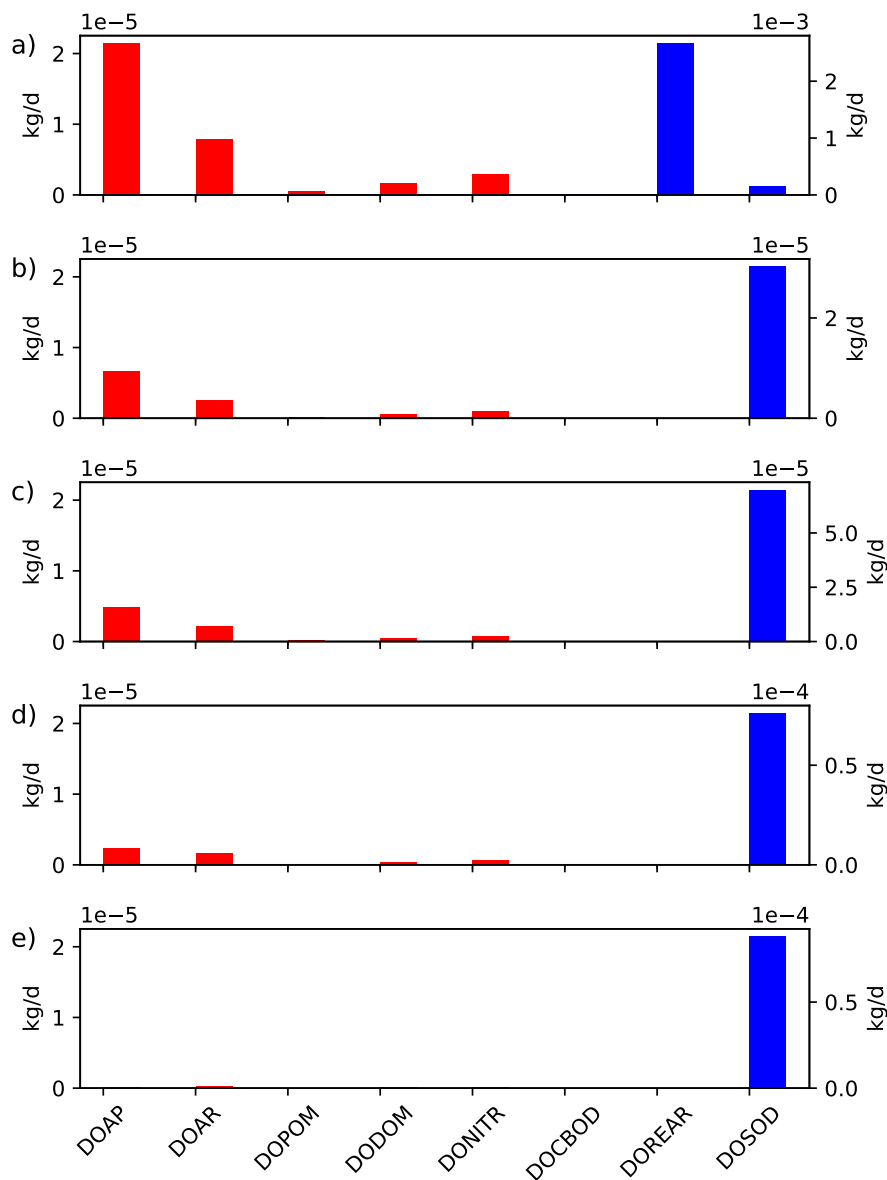


Figura 5.2: Somatório dos fluxos de Oxigênio Dissolvido em todo o período simulado (2006-2010) para as profundidades a) 1m, b) 10m, c)15m, d) 20m, e)29m. As barras azuis correspondem ao segundo eixo y, utilizado pela diferença em ordem de grandeza dos fluxos.

Observa-se que na camada superior (1m), o fluxo predominante é o fluxo positivo de reaeração, e a partir desta camada, o fluxo predominante é o consumo pela demanda do sedimento, o DOSOD. Outro fluxo de consumo que poderia ter um papel importante na simulação seria os diferentes consumos por matéria orgânica. Vale lembrar, no entanto, que por não termos dados observados de matéria orgânica no lago, as variáveis no formato de LDOM, LPOM, RDOM, RPOM e CBOD não foram inseridas no modelo nas condições de

contorno, apenas um valor inicial constante para todos os segmentos em todas as profundidades foi inserido para que o modelo simulasse estas variáveis ($0,1 \text{ g/m}^3$ para LDOM, LPOM, RDOM e RPOM, e $0,01 \text{ g/m}^3$ para CBOD).

Na Figura 5.3 (a-e) está representada a série temporal para todo o período simulado do oxigênio dissolvido nas cinco profundidades.

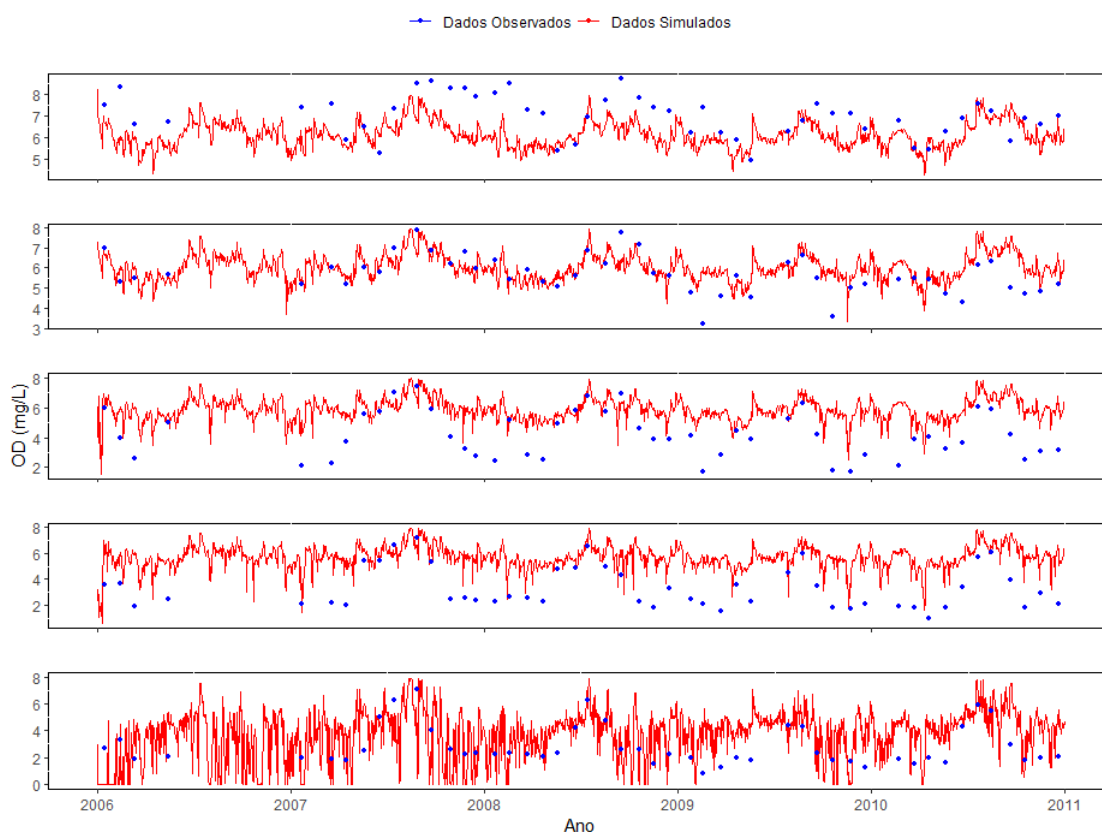


Figura 5.3: Série temporal de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d)20m, e)29m (1m do fundo).

Pode-se observar mais uma vez, como apresentado nos perfis da Figura 5.1, a melhor performance do modelo nas camadas superiores. A partir dos 15m de profundidade, o modelo consistentemente superestima a concentração de OD, até a última camada, quando ocorre uma queda abrupta nas concentrações. Esse comportamento pode ser explicado pelo fato de que, devido à ausência de consumo por matéria orgânica na coluna d'água, supõe-se que o modelo foi forçado a representar maior parte do consumo de oxigênio em toda a coluna através do consumo pelo sedimento, o SOD, que como pôde ser observado na figura 5.2, teve

forte influência até mesmo na camada de 15m.

De fato, o melhor valor encontrado pela rotina de calibração para o SOD foi de 5,39 $\text{gO}_2/\text{m}^3/\text{dia}$ em um intervalo estabelecido de 0 a 5.5 $\text{gO}_2/\text{m}^3/\text{dia}$. O alto valor desta variável mostra que o modelo simulou um consumo de oxigênio “de baixo para cima”. Estabelecendo alto valor de demanda de oxigênio, foi possível diminuir a concentração de O_2 nas camadas superiores até se obter um valor de NSE satisfatório para toda a simulação. Porém, além do modelo não conseguir simular com precisão a profundidade de maior variação da oxiclina, houve o custo de uma simulação pobre na camada de 29m, com vários períodos de anoxia que não representam a realidade dos dados observados.

Na Tabela 5.2, apresenta-se o Erro Médio Absoluto (EMA), o Erro Médio Quadrático (RMSE) e o Nash-Sutcliffe (NSE) calculado para avaliação da simulação em cada camada. Como pode-se observar, os melhores resultados foram encontrados nas primeiras camadas, especialmente na camada de 10m. Para a camada de 15m e 20m, onde o modelo consistentemente superestimou as concentrações, obteve-se piores valores das métricas escolhidas, com uma pequena melhora na última camada, quando as concentrações diminuem bruscamente.

Tabela 5.2: Valores das métricas de avaliação da simulação em cada camada para oxigênio dissolvido.

Profundidade	EMA	RMSE	NSE
1m	0,90 mg/L	1,34 mg/L	-1,04
10m	0,40 mg/L	1,00 mg/L	-0,19
15m	1,91 mg/L	2,29 mg/L	-2,02
20m	2,81 mg/L	2,99 mg/L	-5,20
29m	0,80 mg/L	2,25 mg/L	-2,73

5.2 FÓSFORO TOTAL E NITROGÊNIO AMONIACAL

As séries temporais (2006 - 2010) em todas as profundidades no ponto C para a simulação de Fósforo Total e de Nitrogênio Amoniacal (NH_4) estão dispostas nas Figuras 5.4 e 5.5.

A importância de uma adequada simulação do oxigênio dissolvido para as demais variáveis fica clara quando são analisadas as simulações de nitrogênio e fósforo pelo modelo. Como já citado, no CE-QUAL-W2, quando as reações de desprendimento e de consumo pelo

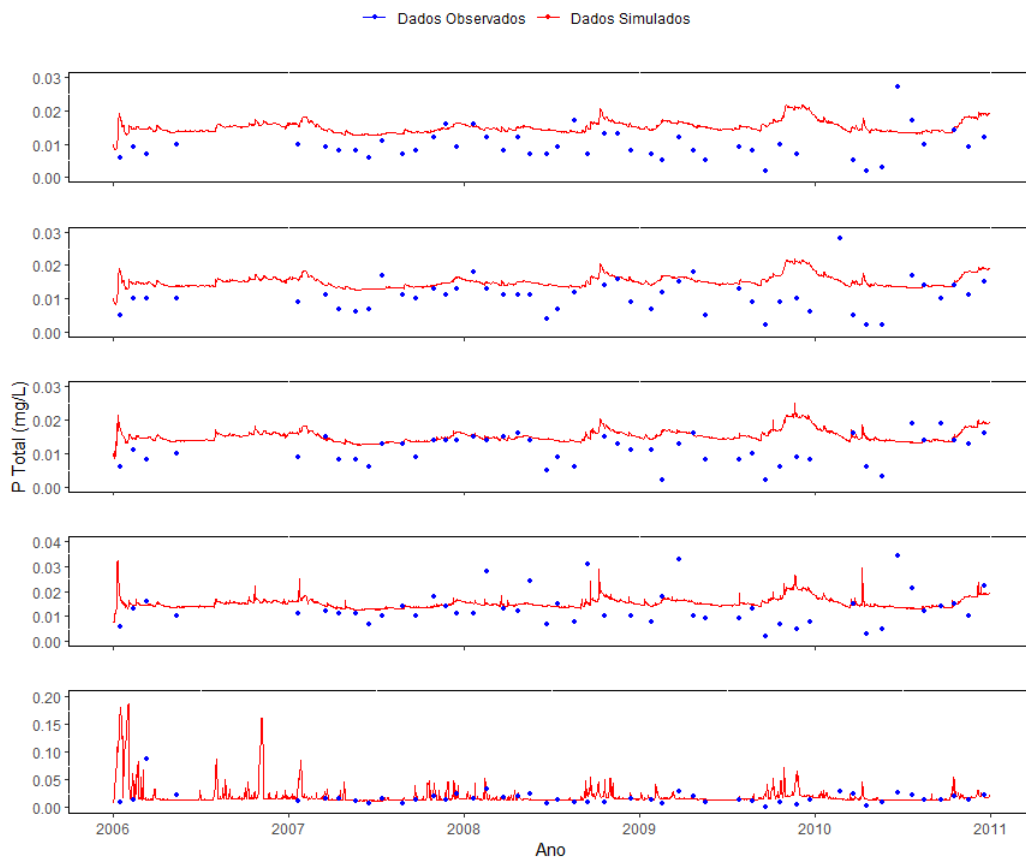


Figura 5.4: Série temporal do Fósforo Total simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d)20m, e)29m (1m do fundo).

sedimento seguem uma reação de ordem zero, a liberação e consumo de fósforo, amônia, carbono inorgânico e ferro, ocorrem em períodos de anoxia da camada acima do sedimento. E como já demonstrado na seção anterior, o modelo simulou vários períodos de anoxia na última camada devido ao alto valor do SOD encontrado na calibração.

Para melhor visualização desse processo, na Figura 5.6, é apresentada a simulação de PT, NH_4 e OD para apenas um ano (escolhido aleatoriamente) na camada de 29m. Como pode-se observar, os maiores picos desses nutrientes na coluna d'água ocorrem no período de suposta anoxia da camada, enquanto um valor aproximadamente constante é mantido nos períodos de mistura do lago.

É evidente que as variáveis que influenciam nesse processo são o PO_4R (liberação de fosfato pelo sedimento) e o NH_4R (liberação de amônia pelo sedimento). Para o fósforo, mesmo um valor aparentemente baixo obtido na calibração para PO_4R (0,006/dia), leva a

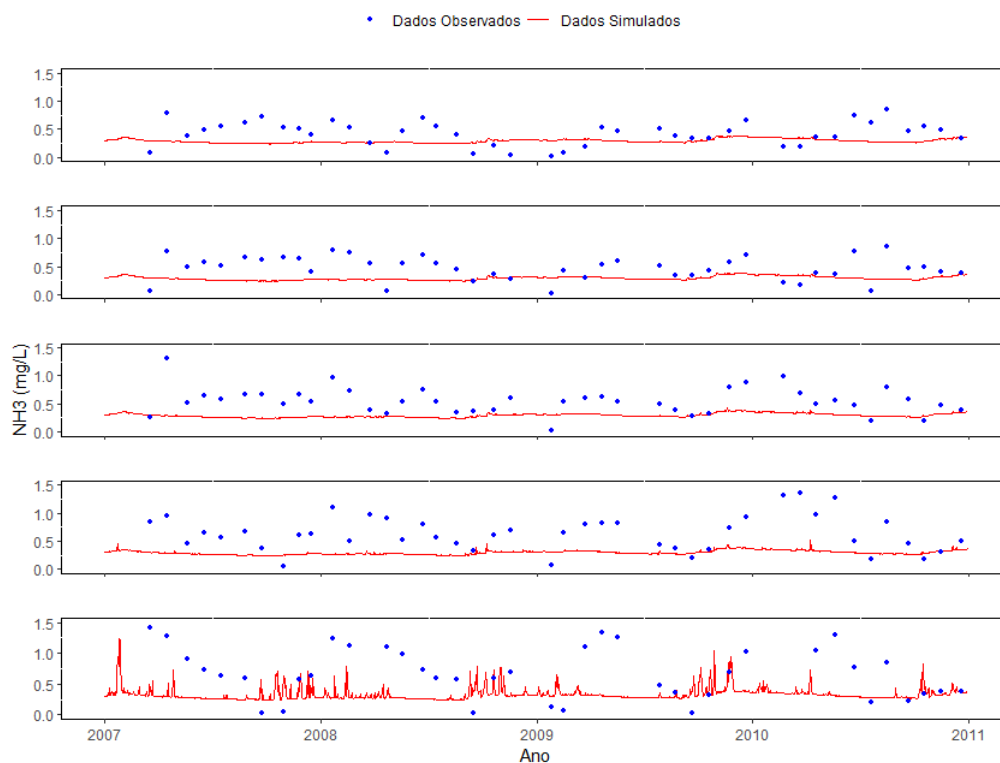


Figura 5.5: Série temporal do Nitrogênio Total simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d)20m, e)29m (1m do fundo).

altos valores de concentração de fósforo nos períodos de anoxia, consistentemente maiores que os dados observados. Isso não ocorre para o nitrogênio amoniacal visto que o modelo subestimou as concentrações desse elemento em todas as camadas.

Nas Figuras 5.7 e 5.8 têm-se os fluxos responsáveis pelas concentrações de PO_4 e de NH_4 . Os fluxos representados para o fósforo são: respiração e crescimento de fitoplâncton (PO_4AR e PO_4AG), decaimento de matéria orgânica particulada (PO_4POM), decaimento de matéria orgânica dissolvida (PO_4DOM), liberação pelo sedimento (PO_4SOD) e sedimentação (PO_4SET). Vale notar que os fluxos de *fonte* de PT são PO_4AR , PO_4POM , PO_4DOM e PO_4SOD , os demais são responsáveis pelo consumo. Como o Fósforo Total não é uma variável de estado do modelo, mas sim um constituinte derivado, o modelo não possibilita a impressão dos fluxos de PT como saída. No entanto, os fluxos de PO_4 parecem representar de forma satisfatória a simulação de PT pelo modelo.

Observa-se que nas camadas superiores do modelo, a presença do fitoplâncton, cuja con-

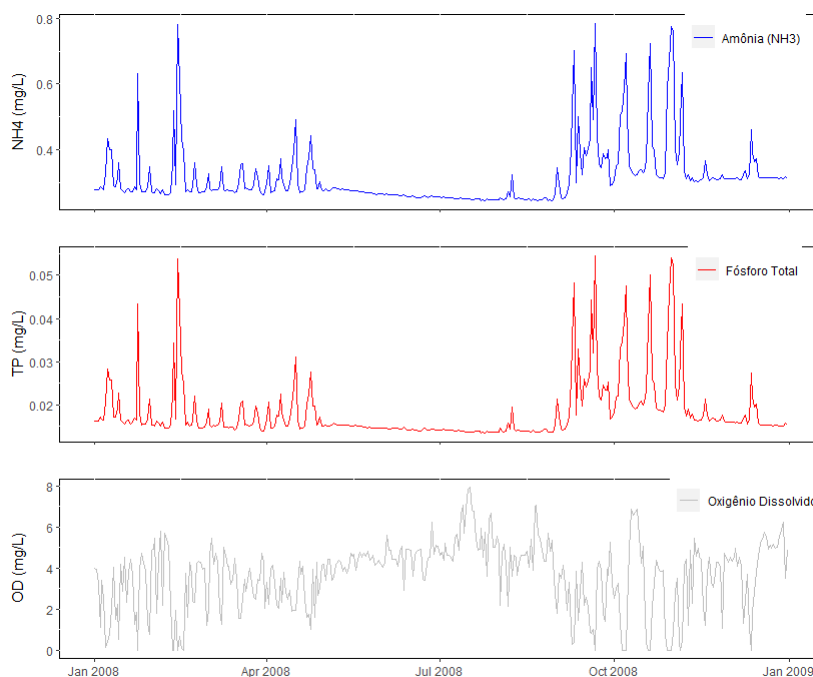


Figura 5.6: Série temporal para o ano de 2008 a 29m de profundidade para a)NH₄, b) TP e c)OD.

centração foi superestimada em todas as camadas pelo modelo (será apresentado mais adiante), tem grande influência na concentração de fósforo. Nesse caso, o fluxo de consumo de fósforo pelo crescimento do fitoplâncton é maior que o liberado durante a respiração. Na última camada, no entanto, a liberação de fósforo pelo sedimento é bastante significativa.

Para o nitrogênio amoniacal (Figura 5.8), os fluxos são bastante similares aos fluxos do fósforo: uma contribuição significativa pelo fitoplâncton nas camadas superiores, e de liberação do sedimento na última camada. Com a diferença de que, para o nitrogênio amoniacal, tem-se também o fluxo de consumo pela nitrificação (NH₄NITR), que nas camadas superiores é o fluxo mais significativo devido à alta concentração de oxigênio nessas camadas.

Para ambos os nutrientes, os dados observados parecem ter uma tendência cíclica com picos de concentração no início dos anos (nos meses mais quentes), e valores mais baixos no meio dos anos, nos meses de mistura do lago. A simulação, no entanto, apesar de acompanhar a mesma tendência cíclica, têm uma amplitude muito menor, não sendo capaz de atingir os valores dos dados observados, sendo esse padrão melhor evidenciado na simulação do nitrogênio amoniacal. Para o fósforo total, o modelo apresentou melhor performance.

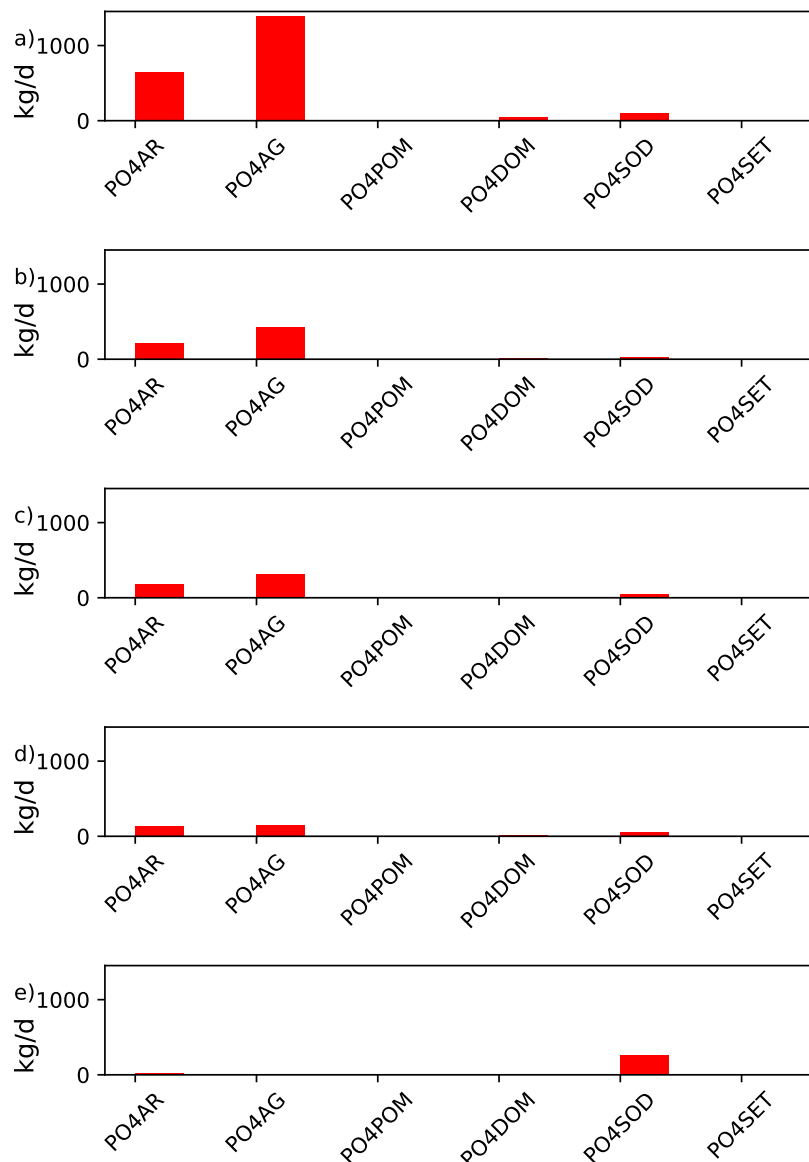


Figura 5.7: Somatório dos fluxos de PO₄ em todo o período simulado (2006-2010) para as profundidades a) 1m, b) 10m, c)15m, d) 20m, e)29m.

Devido à alta dispersão dos dados observados para o nitrogênio amoniacal, na Figura 5.9 é apresentada a série temporal simulada na profundidade de 15m já apresentada na Figura 5.5.c, mas em uma menor intervalo do eixo Y, para que seja possível observar o comportamento simulado dessa variável.

A ausência de dados de matéria orgânica em suas diferentes formas (LDOM, LPOM, RDOM e RPOM) também influenciou na simulação do modelo para essas variáveis, que como demonstrado nas Figuras 3.10 e 3.12 na Seção 3.3.1, junto com a liberação anaeróbia

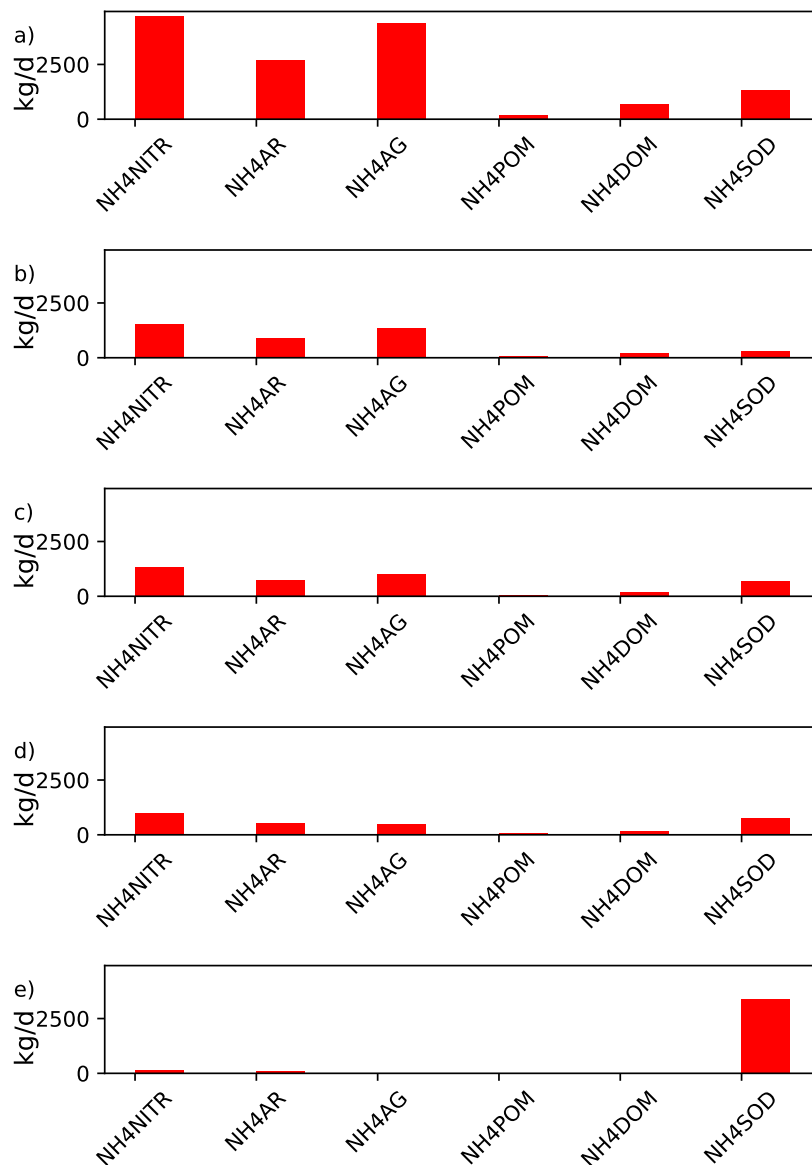


Figura 5.8: Somatório dos fluxos de NH_4 em todo o período simulado (2006-2010) para as profundidades a) 1m, b) 10m, c) 15m, d) 20m, e) 29m.

pelos sedimentos e respiração do fitoplâncton, é uma fonte significativa desses nutrientes na coluna d'água.

Vale observar que o ponto escolhido para calibração (ponto C) se localiza a uma distância considerável das entradas associadas aos braços aqui denominados de acordo com seus rios afluentes (Banal, Gama, Torto e Riacho Fundo) e comumente apresenta dados qualitativos melhores que nos braços. Nesse ponto, os dados relevantes de matéria orgânica provavelmente estariam relacionados às condições de contorno distribuídas, associadas à drenagem



Figura 5.9: Série temporal para todo o período simulado a 15m de profundidade em menor intervalo do eixo Y.

das unidades hidrográficas do entorno do lago.

O modelo é capaz de representar a tendência sazonal desses nutrientes, mas aparentemente teve sua performance afetada pela limitação dos dados de entrada em relação à variável de matéria orgânica. Além disso, uma representação mais fidedigna das concentrações de oxigênio dissolvido no fundo do lago tornariam a simulação de nutrientes mais confiável.

Uma possível maneira de melhorar esses resultados seria adicionar reações de ordem 1 pelo sedimento. Nesse caso, a concentração de nutrientes e demanda de oxigênio são dependentes também da acumulação de sedimento. Vale observar que nesse cenário, o CE-QUAL-W2 apresenta uma limitação por não ser capaz de simular o desprendimento de fósforo ou outros produtos de diagênese em condições anóxicas, sendo prevista pelos desenvolvedores uma melhoria em versões futuras.

Nas Tabelas 5.3 e 5.4, são apresentados o Erro Médio Absoluto (EMA), o Erro Médio Quadrático (RMSE) e o Nash-Sutcliffe (NSE) calculado para avaliação da simulação em cada camada. Para as duas variáveis, as melhores simulações se deram na camada de 1m. Para o fósforo, as camadas de 15m e 20m ainda apresentaram valores mais baixos que na

última camada, enquanto para o nitrogênio amoniacal, ocorreu o oposto.

Tabela 5.3: Valores das métricas de avaliação da simulação em cada camada para fósforo total.

Profundidade	EMA	RMSE	NSE
1m	0,001 mg/L	0,017 mg/L	0,04
10m	0,002 mg/L	0,008 mg/L	-0,14
15m	0,002 mg/L	0,020 mg/L	-0,05
20m	0,004 mg/L	0,032 mg/L	-0,04
29m	0,001 mg/L	0,054 mg/L	-0,39

Tabela 5.4: Métricas para avaliação da simulação em cada camada para nitrogênio amoniacal.

Profundidade	EMA	RMSE	NSE
1m	0,16 mg/L	0,28 mg/L	-0,66
10m	0,21 mg/L	0,30 mg/L	-1,06
15m	0,28 mg/L	0,35 mg/L	-1,55
20m	0,36 mg/L	0,46 mg/L	-1,37
29m	0,42 mg/L	0,65 mg/L	-0,85

5.3 FITOPLÂNCTON

A série temporal para a simulação de fitoplâncton em todas as profundidades está disposta na Figura 5.10, assim como os dados observados (pontos azuis). Vale observar que para todas as variáveis aqui analisadas, esta foi a que se tinha menos dados (total de 53 pontos observados para todo o período).

Como pode-se observar, o modelo superestimou a presença do fitoplâncton em todas as camadas do ponto C, com uma pequena diminuição da concentração na última camada, porém não significativa. A simulação segue o comportamento cíclico observado nas séries temporais das outras variáveis, com valores máximos de concentração no início dos anos (verão), e mais baixos durante os meses mais frios. Os dados observados, apesar de escassos, parecem mostrar comportamento parecido com um “atraso” na série temporal, e em ordem de grandeza menor.

Vale salientar que neste trabalho foi simulado toda a comunidade fitoplanctônica como um grupo único, e que como já citado, o modelo permite a inserção de diferentes grupos com diferentes valores de parâmetros associados. Debele et al. (2008) já apontaram que a

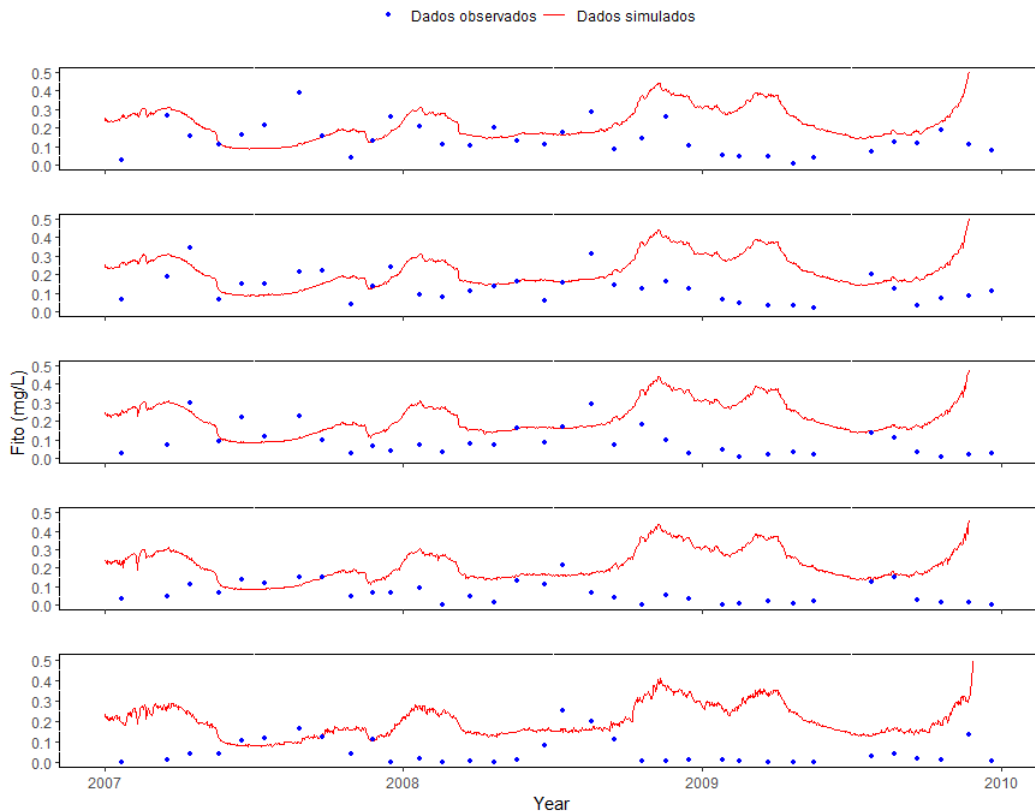


Figura 5.10: Série temporal do Fitoplâncton simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d) 20m, e) 29m (1m do fundo).

simulação de toda a espécie fitoplânctonica por apenas um grupo pode ter uma repercussão negativa nas simulações de Clorofila-a e outras variáveis de qualidade da água que têm relação de causa e efeito com esta variável.

Na Tabela 5.5, são apresentados o Erro Médio Absoluto (EMA), o Erro Médio Quadrático (RMSE) e o Nash-Sutcliffe (NSE) calculado para avaliação da simulação em cada camada. Os melhores valores de simulação se deram nas primeiras camadas, o que era esperado visto as altas concentrações de fitoplâncton simuladas nas camadas mais profundas, onde já não há incidência de luz.

Considera-se que as concentrações de fitoplâncton simuladas pelo modelo são irrealistas, visto que praticamente não há atenuação vertical na coluna d'água. Por isso, na busca de possíveis razões para esse resultado, percebeu-se que após a calibração do módulo de qualidade, houve alterações na simulação de temperatura pelo modelo, que agora permanecia

Tabela 5.5: Valores das métricas de avaliação da simulação em cada camada para Fitoplâncton.

Profundidade	AME	RMSE	NSE
1m	0,16 mg/L	0,21 mg/L	-0,34
10m	0,03 mg/L	0,17 mg/L	-0,41
15m	0,02 mg/L	0,15 mg/L	-0,52
20m	0,05 mg/L	0,13 mg/L	-2,44
29m	0,05 mg/L	0,14 mg/L	-1,37

praticamente constante em toda a coluna d'água, como mostra a Figura 5.11.

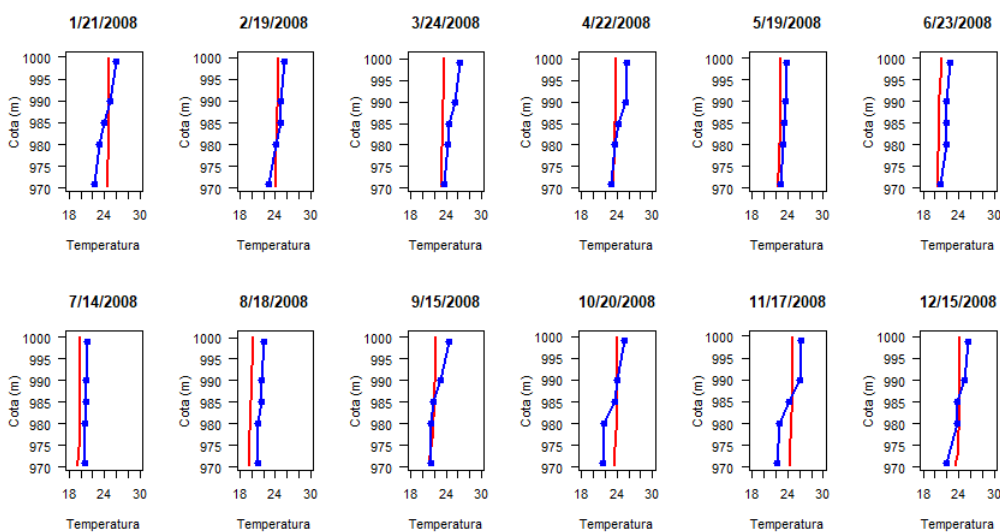


Figura 5.11: Perfil de temperaturas (termoclina) após a calibração do módulo de qualidade e dados observados para o ano de 2008).

Como já citado, os trabalhos com o CE-QUAL-W2 no Lago Paranoá continuam em andamento no PTARH-UnB. Um trabalho realizado, concomitantemente, por outro pesquisador do grupo de pesquisa buscava diferentes abordagens para a obtenção de melhores coeficientes de calibração para o módulo hidrodinâmico. Esse outro trabalho, ainda não publicado, utilizando-se também de calibração automática, encontrou os coeficientes do módulo hidrodinâmico dispostos na Tabela 5.6, que foram inseridos no modelo já calibrado para a qualidade de água.

Com esse novo conjunto de valores, foi observada melhora na simulação de temperatura, mais próxima do que se obtinha anteriormente, como mostra a Figura 5.12. No entanto, o módulo de qualidade foi inteiramente afetado, sendo simulada anoxia em quase todo o período simulado a partir dos 15 metros de profundidade.

Tabela 5.6: Novo conjunto de parâmetros calibrados para o módulo hidrodinâmico.

Parâmetro	Valor calibrado
Viscosidade Turbulenta Horizontal (AX)	65,54 m/s
Difusividade Turbulenta Horizontal (DX)	25,13 m/s
Coefficiente de troca de calor do sedimento (CBHE)	0,99 W/m ² /s
Temperatura do sedimento (TSED)	21,53 °
Fração da radiação solar incidente absorvida na superfície da água (BETA)	0,72
Coefficiente de extinção da água (EXH2O)	0,12 m ⁻¹
Coefficiente "a" na fórmula da velocidade do vento (AFW)	9,6 Wm ⁻² mmHg ⁻¹
Coefficiente "b" na fórmula da velocidade do vento (BFW)	0,30 Wm ⁻² mm Hg ⁻¹ (ms ⁻¹) ^{-c f w}
Coefficiente "c" na fórmula da velocidade do vento (CFW)	1,72
Coefficiente de abrigo do vento (WSC)	0,72
Coefficiente de rugosidade (FRIC)	21,26

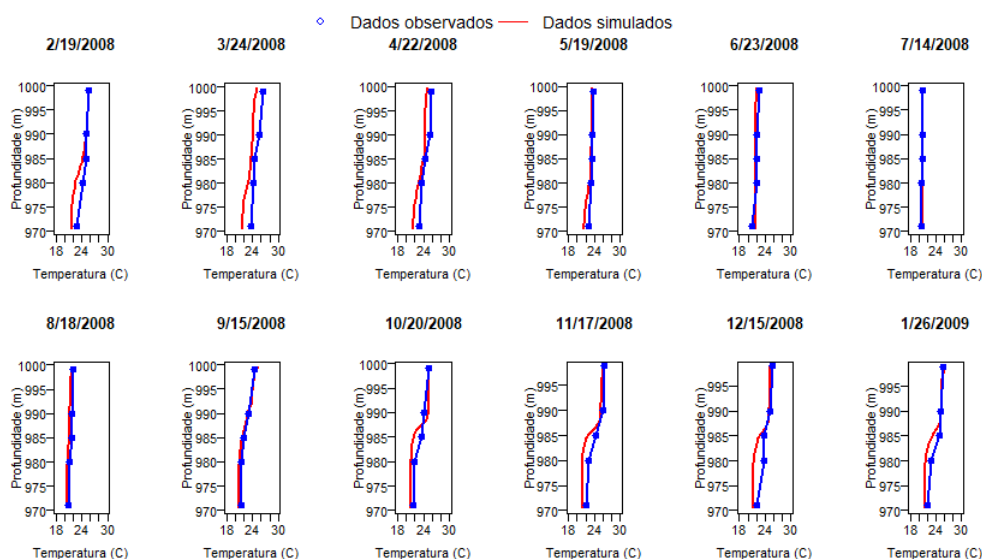


Figura 5.12: Perfil de temperaturas (termoclina) simulado após a calibração hidrodinâmica com novo conjunto de valores e dados observados de 2008).

Dessa forma, como última tentativa, o algoritmo foi utilizado novamente, calibrando todas as variáveis descritas na Tabela 4.3 em uma única rodada, dessa vez com 250 repetições e tendo apenas o Oxigênio Dissolvido como variável objetivo. Nas Figuras 5.13 e 5.14 estão demonstradas as séries temporais para OD e Fitoplâncton. Os gráficos das demais variáveis, assim como o novo conjunto de valores obtidos após a calibração podem ser encontrados no

Apêndice F.

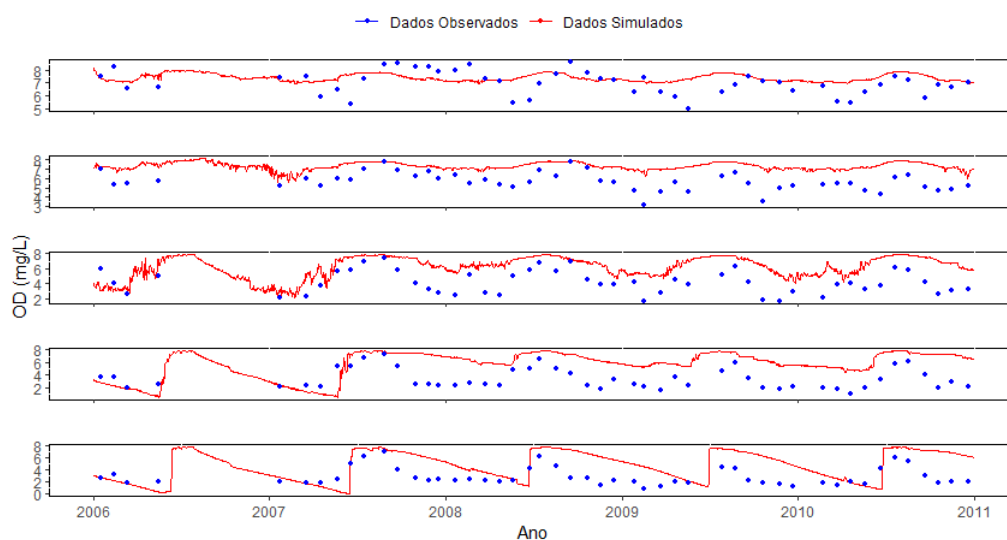


Figura 5.13: Série temporal de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d) 20m, e) 29m (1m do fundo).

A diferença entre os valores obtidos com o algoritmo de calibração inicialmente e com a nova simulação hidrodinâmica foi bastante significativa, e a simulação final, mesmo após as 250 repetições, não parece satisfatória. Novamente pode-se observar uma dificuldade do modelo em reproduzir a diminuição da concentração de OD nas camadas mais profundas, o que ainda atribuímos como, provavelmente, à ausência de dados de entrada de matéria orgânica. Dessa vez, no entanto, o modelo não parece ser capaz de reproduzir ao menos a tendência ao longo do ano como observado anteriormente.

O modelo se mostrou ainda mais sensível ao valor de SOD com a nova calibração hidrodinâmica, visto que nessa configuração, o valor encontrado foi extremamente baixo em comparação ao anterior (0,12 em vez de 5,39 g/m²/dia), e valores mais altos levavam à completa anoxia das camadas mais profundas.

Para o fitoplâncton, mais uma vez o modelo superestimou a concentração desta variável em todas as camadas, apesar da variável objetivo ter sido o Oxigênio Dissolvido. No entanto, nesta configuração, foi possível visualizar a atenuação das concentrações de Algas (fitoplâncton) na coluna d'água, comportamento mais próximo da realidade.

Apesar de não terem sido feitos mais esforços para investigação do comportamento des-

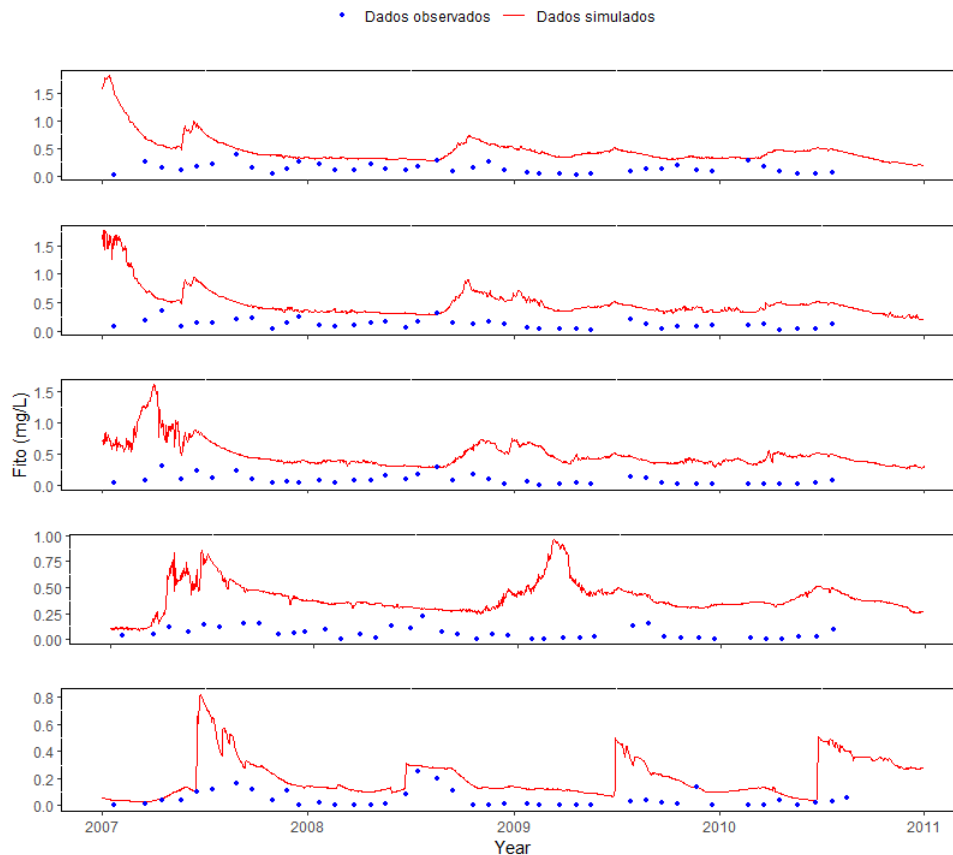


Figura 5.14: Série temporal de Fitoplâncton simulado (linha vermelha) e dados observados (pontos azuis) para a) 1m de profundidade, b) 10m, c) 15m, d) 20m, e) 29m (1m do fundo).

critério para essas variáveis, o que fica evidente após as tentativas de calibração do modelo é que esta não deve ser realizada separadamente nos módulos hidrodinâmico e de qualidade da água, pois, como evidenciado no manual do modelo, os dois módulos se retroalimentam continuamente. Recomenda-se que em trabalhos futuros tal observação seja levada em consideração.

5.4 AVALIAÇÃO DA ROTINA COMPUTACIONAL DE CALIBRAÇÃO

Como já citado, o algoritmo utilizado nesse trabalho havia sido previamente utilizado no trabalho de Barros (2019), que teve como área de estudo o lago Descoberto, também no Distrito Federal, e como foco, a calibração do módulo hidrodinâmico do CE-QUAL-W2. Após mais de 7 mil execuções do modelo, o autor afirma que o algoritmo se revelou

uma eficiente ferramenta para a amostragem de conjuntos de parâmetros no CE-QUAL-W2, alcançando um número de amostras 100 vezes maior do que foi observado em outros trabalhos com esse modelo nessa área de estudo.

De fato, a complexidade desse modelo em relação à quantidade de coeficientes para cada variável aqui simulada, torna a tarefa da calibração manual custosa, principalmente devido ao fato de que esses coeficientes não são independentes, e como já apresentado, também não o são o módulo hidrodinâmico e de qualidade da água.

O algoritmo de calibração utilizado tem duas fases: a fase de aquecimento e a fase onde se inicia a etapa de evolução do modelo, onde são formados os diferentes complexos evolutivos. Foram escolhidos 12 complexos evolutivos na configuração inicial da rotina, como já citado, mas esse valor nunca foi alcançado em nenhum dos cenários de calibração aqui definidos, devido ao número de iterações escolhido (150). Este número foi escolhido devido ao tempo e custo computacional que tal operação demandava do computador.

Neste trabalho, o algoritmo foi utilizado em um computador *laptop* com processador Intel(R) Core(TM) i5-5200U CPU @ 2.2GHz 2.19GHz 4GB RAM, e levou cerca de 4 dias para rodar todas as iterações para uma única variável. No último caso, quando foram rodadas 250 iterações, levou cerca de uma semana.

O que foi observado é que dentre as duas etapas do algoritmo, a etapa de aquecimento se mostrou como sendo a mais significativa, representando cerca de 60% de todas as iterações quando o algoritmo era rodado, indicando assim, que um número maior de iterações seria necessário para melhor explorar a etapa evolutiva do método. Recomenda-se que a calibração do módulo de qualidade com esse algoritmo seja feita em um computador de alta performance, principalmente se for realizada em paralelo com a calibração do módulo hidrodinâmico, o que também se recomenda.

Apesar das limitações, considera-se que o algoritmo utilizado neste trabalho é de fato uma boa ferramenta para auxílio da calibração do CE-QUAL-W2, permitindo que fossem dados os primeiros passos na calibração do módulo de qualidade da água com este modelo nesta área de estudo, e por agilizar a calibração simultânea dos parâmetros para as diferentes

variáveis aqui simuladas.

Na Figura 5.15 compara-se os valores de Nash-Sutcliffe obtidos nas diferentes profundidades para o Oxigênio Dissolvido com i) os valores *default* do modelo (apenas para referência de linha de base); ii) rodando o modelo com a média dos valores encontrados no levantamento bibliográfico descrito na seção 3.3.2; e iii) após a calibração utilizando a rotina computacional desenvolvida.

Como pode-se observar, apesar de ainda serem necessários aprimoramentos na calibração do modelo, o uso da rotina computacional com a finalidade de calibração trouxe melhoras significativas na simulação quando comparado à simulação com os valores encontrados na literatura, principalmente nas camadas de 10m e na camada de fundo.

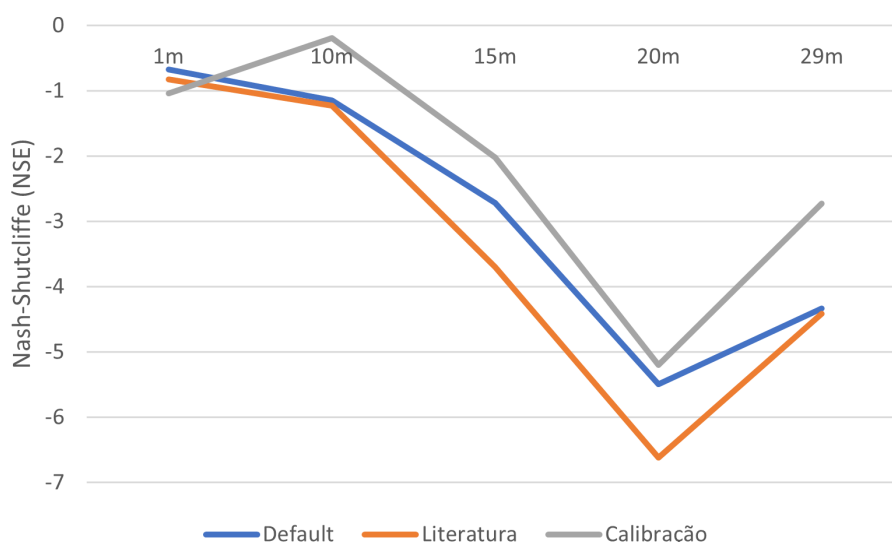


Figura 5.15: Valores de Nash-Sutcliffe para as 5 profundidades em três diferentes cenários: i) modelo com valores *default* (linha de base); ii) modelo com valores médios encontrados na literatura; iii) modelo após a calibração com o algoritmo utilizando a técnica de otimização SCE-UA.

Outro ponto a ser levantado é que, neste trabalho, o lago Paranoá foi dividido em cinco corpos d'água devido aos benefícios que tal discretização poderia trazer à simulação: a possibilidade de se inserir cinco arquivos meteorológicos e demais arquivos de entrada, assim como a possibilidade de se ter parâmetros diferentes para cada um deles. Esta abordagem parece razoável, visto as diferentes características dos afluentes ao lago e suas respectivas bacias.

Como um passo inicial na calibração do módulo de qualidade da água do CE-QUAL-W2 utilizando uma rotina computacional, optou-se por, preliminarmente, simular apenas um valor da variável de decisão para os cinco corpos d'água, o que, como mencionado, já demandava um custo computacional significativo para a calibração. Além disso, ainda não foi possível utilizar os dados meteorológicos de anemômetros instalados em diferentes pontos ao redor do lago, resultantes do trabalho de Nunes (2018).

Em outras palavras, as possíveis vantagens que a discretização do lago poderia trazer não foram ainda exploradas, e todo o processo de calibração foi realizado apenas com base no ponto C, o único ponto em que havia dados observados em mais de uma profundidade, o que também pode ter sido uma limitação do processo de calibração.

6 CONCLUSÃO

O modelo CE-QUAL-W2 é um modelo bastante abrangente, contando com diversos módulos e variáveis que interagem entre si, e que, portanto, requer certo esforço na preparação de seus arquivos iniciais e de condições de contorno, assim como na etapa de calibração pela quantidade de parâmetros associados às diferentes variáveis. Na simulação da qualidade do Lago Paranoá, o modelo se mostrou capaz de simular processos importantes, como os períodos de mistura completa e estratificação desse ambiente.

Algumas dificuldades encontradas que podem ter afetado os resultados deste trabalho, além dos já apontados em trabalhos anteriores como a distância dos postos meteorológicos em relação ao lago (Liporoni, 2012), podem estar associadas à ausência de dados observados de matéria orgânica em suas formas dissolvida e particulada, lábil e refratária (LDOM, LPOM, RDOM e RPOM) para a construção dos arquivos iniciais e de condições de contorno do modelo.

Além disso, é pouco comum se ter uma caracterização precisa da qualidade das águas de drenagem urbana, responsável pelas entradas distribuídas no lago. Os dados aqui utilizados foram obtidos de estudos com caracterização pontuais, e acredita-se que um monitoramento mais adequado levaria a melhores resultados também neste trabalho.

No tocante ao monitoramento, considera-se ainda que uma frequência maior de dados qualitativos, assim como o monitoramento de perfis verticais em mais pontos, também levaria a uma melhor simulação pelo modelo.

Neste trabalho, duas tentativas de simulação do módulo de qualidade da água foram feitas, devido ao fato de que o módulo hidrodinâmico precisou ser ajustado após a primeira tentativa. Inicialmente, foi obtido um valor de Nash-Sutcliffe para o Oxigênio Dissolvido no valor de -0,06 (considerando todas as profundidades como uma única série de dados), melhor valor dentre todas as variáveis analisadas. O modelo foi capaz de simular com alguma precisão os períodos de mistura completa do lago, no entanto, o consumo de oxigênio por matéria orgânica na coluna d'água não foi representativo pela ausência de dados desta

variável nos dados de entrada do modelo.

Foi simulada uma coluna d'água bem oxigenada em quase sua totalidade, com uma brusca diminuição na última camada ocasionada pela alta demanda do sedimento (SOD), o que também levou a períodos de anoxia na camada de 29m. Esse fato parece ter tido influência direta na simulação de nutrientes e da comunidade fitoplanctônica. Como as reações pelo sedimento foram simuladas como reações de ordem-0, nos períodos de anoxia aqui citados ocorria liberação significativa de fósforo total e nitrogênio amoniacal na coluna. Dessa forma, para o fósforo, observou-se uma superestimação do modelo nesses períodos, principalmente na camada de 29m.

De forma similar, a liberação de amônia pelo sedimento também ocasionou em picos de concentração na última camada para o nitrogênio amoniacal, no entanto, o modelo consistentemente subestimou as concentrações desse elemento. Fluxos significativos de retirada de NH_4 da coluna foram a nitrificação e a retirada pelo crescimento do fitoplanctôn. Este, por sua vez, também foi superestimado pelo modelo em todas as camadas, não apresentando, inicialmente, atenuação vertical na coluna d'água, mesmo a 29m de profundidade.

Percebeu-se então que o módulo hidrodinâmico havia sido afetado após a calibração do módulo de qualidade da água, sendo simuladas temperaturas praticamente constantes em toda a coluna d'água, ocasionando as altas concentrações de Fitoplâncton e de OD, assim como o efeito que o excesso de fitoplâncton teve na simulação de Fósforo e Nitrogênio.

Quando esse módulo foi corrigido, foi possível observar concentrações de Fitoplâncton mais próximas da realidade, apesar de ser necessário ainda um esforço maior para melhorar a simulação desta e das demais variáveis citadas neste trabalho. Foi possível observar assim que os módulos hidrodinâmico e de qualidade da água não devem ser calibrados separadamente.

Ainda assim, o CE-QUAL-W2 se apresenta como uma ferramenta potencial para a simulação de qualidade do Lago Paranoá, não sendo identificada, inicialmente, limitação significativa inerente ao modelo quando aplicado nesta área de estudo, apenas o já mencionado processo de calibração manual que pode requerer certo esforço.

O algoritmo para calibração utilizando a técnica de otimização SCEU-UA se mostrou como um auxílio importante neste trabalho, que teve como objetivo realizar uma exploração inicial no módulo de qualidade da água do CE-QUAL-W2 no Lago Paranoá, o que ainda não havia sido realizado. O uso do algoritmo permitiu que diferentes variáveis fossem calibradas de uma só vez, trazendo ganhos na simulação, o que foi observado analisando os valores de NSE obtidos após a calibração e na simulação com valores levantados na literatura, assim como no tempo necessário para a obtenção desses resultados.

6.1 RECOMENDAÇÕES

Para trabalhos futuros, recomenda-se que a calibração seja realizada com base nos dados dos demais pontos disponíveis (pontos A, B, D e E), permitindo que sejam calibrados parâmetros diferentes para cada parte do lago.

Ainda, trabalhos futuros podem ter um cenário de calibração de Oxigênio Dissolvido em que se tenta ajustar apenas a camada de fundo, como uma tentativa de evitar as errôneas simulações de anoxia na última camada, e ainda, considerar o uso de reações de ordem-1 em relação ao desprendimento de compostos pelo sedimento para avaliação do efeito na simulação de nutrientes.

Como já citado, também recomenda-se que os módulos hidrodinâmico e de qualidade da água sejam calibrados concomitantemente, visto os efeitos da calibração entre os dois módulos, de preferência em computadores de alta performance. Recomenda-se ainda que sejam consideradas outras métricas como função objetivo da rotina computacional além do Nash-Sutcliffe.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Adasa (2016). Resolução nº 15, de 16 de setembro de 2016. *Diário Oficial do Distrito Federal*. n. 177, de 19 de setembro de 2016, Seção 1, p.9.
- Afshar, A., Kazemi, H., and Saadatpour, M. (2011). Particle Swarm Optimization for Automatic Calibration of Large Scale Water Quality Model (CE-QUAL-W2): Application to Karkheh Reservoir, Iran. *Water Resources Management*, 25(10):2613–2632.
- Afshar, A. and Saadatpour, M. (2009). Reservoir eutrophication modeling, sensitivity analysis, and assessment: application to Karkheh Reservoir, Iran. *Environmental engineering science*, 26(7):1227–1238.
- Aguilera, J., J., F., Gordillo, L., Karsten, U., Figueroa, F. L., and Niell, F. X. (2000). Light quality effect on photosynthesis and efficiency of carbon assimilation in the red alga *Porphyra leucosticta*. *Journal of Plant Physiology*, 157(1):86–92.
- Ansari, A. A., editor (2010). *Eutrophication: causes, consequences and control*. Springer Science+Business Media, 2011, Dordrecht ; New York. OCLC: ocn646114298.
- Araujo, F. S. and Souto, M. M. (2013). Estudo topográfico da bacia do lago paranoá considerando a visibilidade do conjunto urbanístico tombado de Brasília. In *Anais XVI Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto*. SBSR.
- Bai, S. and Lung, W. (2005). Numerical modeling of algae in the Patuxent estuary. *International Journal of River Basin Management*, 3(4):273–281.
- Barros, R. P. (2018). Modelagem matemática e calibração aplicadas ao reservatório do descoberto - DF/GO. Master's thesis, Universidade de Brasília, Pós Graduação em Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos (PTARH - UnB), Brasília, DF.
- Bartholow, J., Hanna, R. B., Saito, L., Lieberman, D., and Horn, M. (2001). Simulated

- limnological effects of the shasta lake temperature control device. *Environmental Management*, 27(4):609–626.
- Batista, B. D. and Fonseca, B. M. (2018). Fitoplâncton da região central do Lago Paranoá (DF): uma abordagem ecológica e sanitária. *Engenharia Sanitaria e Ambiental*, 23(2):229–241.
- Bhagowati, B. and Ahamad, K. U. (2019). A review on lake eutrophication dynamics and recent developments in lake modeling. *Ecohydrology & Hydrobiology*, 19(1):155–166.
- Braga, B. (2007). *Introdução à engenharia ambiental: o desafio do desenvolvimento sustentável*. Pearson Prentice Hall, São Paulo. OCLC: 246926148.
- Brandão, A., Lima, J. E. F. W., and Ramos, A. E. (2018). Dinâmica da população e do uso e ocupação da terra do distrito federal. In Lima, J. E. F. W., Freitas, G. K., Pinto, M. A. T., and Salles, P. S. B. A., editors, *Gestão da Crise Hídrica 2016-2018 Experiências do Distrito Federal*, pages 12–22. Adasa: Caesb: Seagri: Emater, Brasília, DF.
- Brasil (2005). Conselho nacional do meio ambiente. resolução nº357, de 17 de março de 2005. *Diário Oficial da União*. nº 053, de 18/03/2005, págs. 58-63.
- Brasil (2011a). Conselho nacional do meio ambiente. resolução nº 430, de 13 de maio de 2011. *Diário Oficial da União*. Brasília, 16 de maio de 2011.
- Brasil (2011b). Ministério da saúde. portaria nº 2.914, de 12 de dezembro de 2011. *Diário Oficial da União*. Brasília.
- Brito, D., Ramos, T. B., Gonçalves, M. C., Morais, M., and Neves, R. (2018). Integrated modelling for water quality management in a eutrophic reservoir in south-eastern Portugal. *Environmental Earth Sciences*, 77(2).
- Burnett, J. A. B., Mattos, S. P., and Azzolin, N. M. P. (2001). "IX: Intervenções da Companhia de Saneamento" in Fonseca, F.O. (org). Secretaria de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (SEMARH), Brasília, DF.

- Caesb (2005). Projeto basico para ampliacao dos sistemas de abastecimento de agua do distrito federal utilizando como manancial o lago paranoa - tomo 01: Memorial justificativo para captação no lago paranoa, parte 2. Technical report, Companhia de Saneamento do Distrito Federal.
- Cetesb (2007). Relatório de qualidade das Águas interiores no estado de são paulo: 2006. Série relatórios, Cetesb, São Paulo.
- Chang, C.-H., Cai, L.-Y., Lin, T.-F., Chung, C.-L., van der Linden, L., and Burch, M. (2015). Assessment of the Impacts of Climate Change on the Water Quality of a Small Deep Reservoir in a Humid-Subtropical Climatic Region. *Water*, 7(12):1687–1711.
- Chuo, M., Ma, J., Liu, D., and Yang, Z. (2019). Effects of the impounding process during the flood season on algal blooms in Xiangxi Bay in the Three Gorges Reservoir, China. *Ecological Modelling*, 392:236–249.
- Cole, T. M. and Tillman, D. H. (2001). Water quality modelling of allatoona and west point reservoirs using ce-qual-w2. Relatório, US Army Corps of Engineers, Vicksburg, MS.
- Cole, T. M. and Wells, S. A. (2019). Ce-qual-w2: A two-dimensional, laterally averaged, hydrodynamic and water quality model, version 4.2. Technical report, Portland State University, Department of Civil and Environmental Engineering, Portland, OR.
- Debele, B., Srinivasan, R., and Parlange, J.-Y. (2008). Coupling upland watershed and downstream waterbody hydrodynamic and water quality models (SWAT and CE-QUAL-W2) for better water resources management in complex river basins. *Environmental Modeling & Assessment*, 13(1):135–153.
- Dehbalaei, F. N. and Javan, M. (2018). Assessment of Selective Withdrawal and Inflow Control on the Hydrodynamics and Water Quality of Ilam Reservoir. *Water Environment Research*, 90(4):307–321.

- Dehbalaei, N., Javan, M., Eghbalzaeh, A., Eftekhari, M., and Fatemi, S. E. (2016). Assessment of ilam reservoir eutrophication response in controlling water inflow. *Civil Engineering Infrastructures Journal*, 49(2):215–234.
- Deus, R., Brito, D., Mateus, M., Kenov, I., Fornaro, A., Neves, R., and Alves, C. (2013). Impact evaluation of a pisciculture in the Tucuruí reservoir (Pará, Brazil) using a two-dimensional water quality model. *Journal of Hydrology*, 487:1–12.
- DF (2016). Acordo de cooperação técnica- ACT nº 001/2016 SEGETH- secretaria de estado de gestão do território e habitação; CODEPLAN - companhia de planejamento do distrito federal. Brasília, 2016. Disponível em: <http://www.observatorioterritorial.segeth.df.gov.br>. Acesso em jun. 2021.
- Diogo, P., Fonseca, M., Coelho, P., Mateus, N., Almeida, M., and Rodrigues, A. (2008). Reservoir phosphorous sources evaluation and water quality modeling in a transboundary watershed. *Desalination*, 226(1-3):200–214.
- Duan, Q., Sorooshian, S., and Gupta, V. (1992). Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models. *Water Resources Research*, 28(4):1015–1031.
- Elmoor-Loureiro, L. M. A. (2004). Aspectos ecomorfológicos em Bosmina (crustacea, cladocera) no Lago Paranoá, Brasília - DF. *Braz. J. Biol.*, 64(3A):415–422.
- Esteves, F. d. A. (2011). *Fundamentos de Limnologia*. Interciência, Rio de Janeiro, 3 edition.
- Fath, B., Jørgensen, S., and Scharler, U. (2011). Ecological Modeling in Environmental Management. In *Treatise on Estuarine and Coastal Science*, pages 23–33. Elsevier.
- Gastaldini, M. d. C. C., Paz, M. F., Thomaz, F., and Kraemer, M. C. N. (2012). Simulação do Oxigênio Dissolvido e da temperatura no Reservatório do Arroio Vacacaí-Mirim utilizando o modelo CE-QUAL-W2. In *21o. Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental*. ABES.

- GDF (2012). Revisão e atualização do plano de gerenciamento integrado de recursos hídricos do distrito federal. *Volume I-Diagnóstico*. Brasília - DF.
- Glibert, P. M., Allen, J. I., Bouwman, A., Brown, C. W., Flynn, K. J., Lewitus, A. J., and Madden, C. J. (2010). Modeling of HABs and eutrophication: Status, advances, challenges. *Journal of Marine Systems*, 83(3-4):262–275.
- Ha, S. and Lee, J. (2008). Application of ce-qual-w2 model to eutrophication simulation in daecheong reservoir stratified by turbidity storms. *Proceedings of Taal2007: The 12th World Lake Conference*.
- Harris, G. P. (1987). *Phytoplankton Ecology*. Springer Netherlands, Dordrecht.
- Hipsey, M. R., Hamilton, D. P., Hanson, P. C., Carey, C. C., Coletti, J. Z., Read, J. S., Ibelings, B. W., Valesini, F. J., and Brookes, J. D. (2015). Predicting the resilience and recovery of aquatic systems: A framework for model evolution within environmental observatories: PREDICTING THE RESILIENCE OF AQUATIC SYSTEMS. *Water Resources Research*, 51(9):7023–7043.
- Jacobi, P. R., Cibim, J., and Leão, R. d. S. (2015). Crise hídrica na Macrometrópole Paulista e respostas da sociedade civil. *Estudos Avançados*, 29:27 – 42.
- Knapik, H. G. (2014). Organic matter characterization and modeling in polluted rivers for water quality planning and management. Master's thesis, Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-Graduação em Recursos Hídricos e Engenharia Ambiental, Curitiba, PR.
- Kuchinski, V. and Cauduro Gastaldini, M. d. C. (2018). Modeling the Trophic State of Subtropical Reservoir in Southern Brazil. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 144(3):05018001.
- Kuo, J.-T., Lung, W.-S., Yang, C.-P., Liu, W.-C., Yang, M.-D., and Tang, T.-S. (2006). Eu-

- trophication modelling of reservoirs in Taiwan. *Environmental Modelling & Software*, 21(6):829–844.
- Lian, J., Yao, Y., Ma, C., and Guo, Q. (2014). Reservoir Operation Rules for Controlling Algal Blooms in a Tributary to the Impoundment of Three Gorges Dam. *Water*, 6(10):3200–3223.
- Lima, J. E. F. W., Fonseca, S. A., Brostel, R. C., and César, M. C. M. (2018). Avaliação da disponibilidade hídrica do distrito federal. In Lima, J. E. F. W., Freitas, G. K., Pinto, M. A. T., and Salles, P. S. B. A., editors, *Gestão da Crise Hídrica 2016-2018 Experiências do Distrito Federal*, pages 35–48. Adasa: Caesb: Seagri: Emater, Brasília, DF.
- Liporoni, L. M. (2012). Estudo preliminar da qualidade da água do lago paranoá, Brasília - DF, utilizando um modelo de qualidade de água bidimensional. Master's thesis, Universidade de Brasília, Pós Graduação em Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos (PTARH - UnB), Brasília, DF.
- Liu, W.-C., Chen, W.-B., and Kimura, N. (2009). Impact of phosphorus load reduction on water quality in a stratified reservoir-eutrophication modeling study. *Environmental Monitoring and Assessment*, 159(1-4):393–406.
- Martin, J. L. (1987). Application of a two-dimensional model of hydrodynamics and water quality (ce-qual-w2) to degray lake, arkansas. Relatório técnico, US Army Corps of Engineers, Vicksburg, MS.
- McCuen, R. H., Knight, Z., and Cutter, A. G. (2006). Evaluation of the Nash–Sutcliffe Efficiency Index. *Journal of Hydrologic Engineering*, 11(6):597–602.
- Menció, A., Casamitjana, X., Mas-Pla, J., Coll, N., Compte, J., Martinoy, M., Pascual, J., and Quintana, X. (2017). Groundwater dependence of coastal lagoons: The case of La Pleta salt marshes (NE Catalonia). *Journal of Hydrology*, 552:793–806.

- Menezes Jr., A., Sinoti, M. L., and Saraiva, R. C. F. (2001). *"II: Historico" in Fonseca, F.O. (org). Secretaria de Meio Ambiente e Recursos Hidricos (SEMARH), Brasilia, DF.*
- Mühlhofer, S. I. and Vasconcelos, E. F. S. S. (2018). Expansão e integração dos sistemas de abastecimento. In Lima, J. E. F. W., Freitas, G. K., Pinto, M. A. T., and Salles, P. S. B. A., editors, *Gestão da Crise Hídrica 2016-2018 Experiências do Distrito Federal*, pages 213–228. Adasa: Caesb: Seagri: Emater, Brasília, DF.
- Missaghi, S. and Hondzo, M. (2010). Evaluation and application of a three-dimensional water quality model in a shallow lake with complex morphometry. *Ecological Modelling*, 221(11):1512–1525.
- Mota, S. and Von Sperling, M. (2009). *Nutrientes de esgoto sanitário: utilização e remoção*, volume 1. PROSAB/FINEP, Rio de Janeiro.
- Noori, R., Yeh, H.-D., Ashrafi, K., Rezazadeh, N., Bateni, S. M., Karbassi, A., Kachooangi, F. T., and Moazami, S. (2015). A reduced-order based CE-QUAL-W2 model for simulation of nitrate concentration in dam reservoirs. *Journal of Hydrology*, 530:645–656.
- Nunes, G., Minoti, R. T., and Koide, S. (2020). Thermal pattern analysis of a complex tropical reservoir in Brazil - The Paranoá Lake case. *Hydrology*, 7(85).
- Nunes, G. S. (2018). Estudo das variáveis intervenientes no balanço quali-quantitativo de um sistema bacia-lago: o caso do Lago Paranoá - DF. Master's thesis, Universidade de Brasília, Pós Graduação em Tecnologia Ambiental e Recursos Hídricos (PTARH - UnB), Brasília, DF.
- Oliveira, L. P. H. and Krau, L. (1970). Hidrobiologia geral, aplicada particularmente a veiculadores de esquistossomos. hipereutrofia, mal moderno das águas. *Mem. Inst. Oswaldo Cruz*, 68(1).
- Ostfeld, A. and Salomons, S. (2005). A hybrid genetic—instance based learning algorithm for CE-QUAL-W2 calibration. *Journal of Hydrology*, 310(1-4):122–142.

- O'Sullivan, P. E. and Reynolds, C. S., editors (2005). *Limnology and limnetic ecology*. Number ed. by P. E. O'Sullivan and C. S. Reynolds ; Vol. 1 in The lakes handbook. Blackwell Science, Malden, Mass., 2. print. edition. OCLC: 254911515.
- Philomeno, M. G. (2007). *A comunidade fitoplanctônica e a restauração do lago Paranoá, Brasília - DF*. PhD thesis, Universidade de Brasília, Departamento de Ecologia, Brasília - DF.
- Pires, A. C. B. and Ianniruberto, M. (2008). Caracterização morfológica e estratigráfica do lago paranoá. Projeto de pesquisa, convênio FAPDF nº 33/2008 – Tecnologias Ambientais, com colaboração da Delegacia Fluvial de Brasília (Ministério da Marinha).
- Pourriot, R. (1982). *Ecologie du plancton des eaux continentales*. Masson, Paris; New York. OCLC: 833480198.
- Rangel-Peraza, J. G., Obregon, O., Nelson, J., Williams, G. P., de Anda, J., González-Farías, F., and Miller, J. (2012). Modelling approach for characterizing thermal stratification and assessing water quality for a large tropical reservoir: Thermal stratification and water quality in tropical reservoirs. *Lakes & Reservoirs: Research & Management*, 17(2):119–129.
- Read, J. S., Winslow, L. A., Hansen, G. J., Van Den Hoek, J., Hanson, P. C., Bruce, L. C., and Markfort, C. D. (2014). Simulating 2368 temperate lakes reveals weak coherence in stratification phenology. *Ecological Modelling*, 291:142–150.
- Redfield, A. C., Ketchum, M. N., and Richards, F. A. (1963). *The influence of organisms on the composition of sea-water in The Sea*. Wiley-Interscience, New York.
- Sadeghian, A., Chapra, S. C., Hudson, J., Wheeler, H., and Lindenschmidt, K.-E. (2018). Improving in-lake water quality modeling using variable chlorophyll a/algal biomass ratios. *Environmental Modelling & Software*, 101:73–85.

- Sharma, S., Maeng, S., Nam, S.-N., and Amy, G. (2011). Characterization Tools for Differentiating Natural Organic Matter from Effluent Organic Matter. In *Treatise on Water Science*, pages 417–427. Elsevier.
- Siste, C. E., Girão, E. G., and Duncan, B. L. (2011). Manual para Formação e Capacitação de Grupos Comunitários em Metodologias Participativas de Monitoramento da Qualidade da Água - Módulo III: Avaliação Físico-Química. Technical Report 135, Embrapa Agroindústria Tropical.
- Soullignac, F., Anneville, O., Bouffard, D., Chanudet, V., Dambrine, E., Guénand, Y., Harmel, T., Ibelings, B. W., Trevisan, D., Uittenbogaard, R., and Danis, P.-A. (2019). Contribution of 3d coupled hydrodynamic-ecological modeling to assess the representativeness of a sampling protocol for lake water quality assessment. *Knowledge & Management of Aquatic Ecosystems*, 420:42.
- Streit, N. M., Canterle, L. P., Canto, M. W. d., and Hecktheuer, L. H. H. (2005). The chlorophylls. *Ciência Rural*, 35(3):748–755.
- Taub, F. B., editor (1984). *Lakes and Reservoirs*. Elsevier Science, Amsterdam ; New York : New York, 1 edition edition.
- Torres, E., Galván, L., Cánovas, C. R., Soria-Píriz, S., Arbat-Bofill, M., Nardi, A., Papaspyrou, S., and Ayora, C. (2016). Oxycline formation induced by Fe(II) oxidation in a water reservoir affected by acid mine drainage modeled using a 2d hydrodynamic and water quality model — CE-QUAL-W2. *Science of The Total Environment*, 562:1–12.
- Tucci, C. E. M. (2005). *Modelos hidrológicos*. Editora da UFRGS, Porto Alegre. OCLC: 212884891.
- Tundisi, J. G. and Tundisi, T. M. (2008). *Limnologia*. Oficina de Textos, São Paulo. OCLC: 837501199.

- Von Sperling, M. (2014a). *Estudos e Modelagem da Qualidade da Água de Rios*, volume 7 of *Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias*. UFMG, 2 edition.
- Von Sperling, M. (2014b). *Introdução à Qualidade das Águas e ao Tratamento de Esgotos - Volume 1. Coleção Princípios do Tratamento Biológico de Água*, volume 1 of *Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias*. UFMG, 1 edition.
- Wang, S., Wang, X., Shi, X., Wang, B., Zheng, X., Wang, H., and Liu, F. (2016). Red and Blue Lights Significantly Affect Photosynthetic Properties and Ultrastructure of Mesophyll Cells in Senescing Grape Leaves. *Horticultural Plant Journal*, 2(2):82–90.
- Wetzel, R. G. (2001). *Limnology: lake and river ecosystems*. Academic Press, San Diego, 3rd ed edition.
- Williams, G. P., Obregon, O., Nelson, E. J., Miller, W., Borup, M. B., and Buahin, C. (2014). Sensitivity of water quality indicators in a large tropical reservoir to selected climate and land-use changes. *Lakes & Reservoirs: Research & Management*, 19(4):293–305.
- Wilson, P. R. and Mantooth, H. A. (2013). *Model-Based Engineering for Complex Electronic Systems: Techniques, Methods and Applications*. Newnes, Oxford, U.K.
- Zhang, H., Culver, D. A., and Boegman, L. (2008). A two-dimensional ecological model of Lake Erie: Application to estimate dreissenid impacts on large lake plankton populations. *Ecological Modelling*, 214(2-4):219–241.
- Zouabi-Aloui, B., Adelana, S. M., and Gueddari, M. (2015). Effects of selective withdrawal on hydrodynamics and water quality of a thermally stratified reservoir in the southern side of the Mediterranean Sea: a simulation approach. *Environmental Monitoring and Assessment*, 187(5).
- Zouabi-Aloui, B. and Gueddari, M. (2014). Two-dimensional modelling of hydrodynamics and water quality of a stratified dam reservoir in the southern side of the Mediterranean Sea. *Environmental Earth Sciences*, 72(8):3037–3051.

Zumstein, J. and Buffle, J. (1989). Circulation of pedogenic and aquagenic organic matter in an eutrophic lake. *Water Research*, 23(2):229–239.

Apêndice A Equações do modelo

Equações das taxas de Oxigênio Dissolvido, Amônia, Ortofosfato, Sedimento e Algas (fitoplâncton, aqui citado apenas como "algas" para simplificação) no CE-QUAL-W2

$$\begin{aligned}
 S_{DO} = & \underbrace{\sum (K_{ag} - K_{ar})\delta_{OMa}\phi_a}_{\text{produção líquida por algas}} + \underbrace{\sum (K_{eg} - K_{er})\delta_{OMe}\phi_e}_{\text{produção líquida por epifíton}} + \underbrace{\frac{A_{sur}}{V_{sur}}K_L(\phi_{S_{DO}} - \phi_{DO})}_{\text{aeração}} \\
 & - \underbrace{K_{RPOM}\delta_{OM}\gamma_{OM}\phi_{RPOM}}_{\text{decaimento de RPOM}} - \underbrace{K_{LPOM}\delta_{OM}\gamma_{OM}\phi_{LPOM}}_{\text{decaimento de LPOM}} - \underbrace{K_{LDOM}\gamma_{OM}\delta_{OM}\phi_{LDOM}}_{\text{decaimento de LDOM}} \\
 & - \underbrace{K_{RDOM}\delta_{OM}\gamma_{OM}\phi_{RDOM}}_{\text{decaimento de RDOM}} - \underbrace{K_s\delta_{OM}\gamma_{OM}\phi_{sed}}_{\text{decaimento de 1ª ordem do sedimento}} - \underbrace{SOD\gamma_{OM}\frac{A_{sed}}{V}}_{\text{decaimento de ordem 0 do sedimento}} \\
 & - \underbrace{\sum K_{CBOD}R_{CBOD}\Theta^{T-20}\phi_{CBOD}}_{\text{decaimento de CBOD}} - \underbrace{K_{NH_4}\delta_{NH_4}\gamma_{NH_4}\phi_{NH_4}}_{\text{nitrificação}} + \underbrace{\sum (K_{mg} - K_{mr})\delta_{OMmac}\phi_{macro}}_{\text{produção líquida por macrófitas}} \\
 & - \underbrace{\sum \gamma_{zoo}K_{zr}\delta_{OMzoo}\phi_{zoo}}_{\text{respiração de zooplâncton}} - \underbrace{\delta_{H_2S-O_2}K_{H_2S}\phi_{H_2S} - \delta_{CH_4-O_2}K_{CH_4}\phi_{CH_4} - \delta_{Fe-O_2}K_{Fe-O_2}\phi_{Fe-O_2}}_{\text{oxidação}} \\
 & - \underbrace{\delta_{Mn2-O_2}K_{Mn2}\phi_{Mn2}}_{\text{oxidação}} \quad (A.1)
 \end{aligned}$$

Onde:

S_{DO} = variação da concentração de OD ($\text{g m}^{-3} \text{sec}^{-1}$)

K_{ag} = taxa de crescimento de algas (sec^{-1})

K_{ar} = taxa de respiração de algas (sec^{-1})

K_{eg} = taxa de crescimento do epifíton (sec^{-1})

K_{er} = taxa de respiração do epifíton (sec^{-1})

K_{mg} = taxa de crescimento de macrófitas (sec^{-1})

K_{mr} = taxa de respiração de macrófitas (sec^{-1})

K_{zr} = taxa de respiração de zooplâncton (sec^{-1})

K_{NH_4} = taxa de nitrificação (sec^{-1})

K_{Fe2} = taxa de oxidação do Fe^{+2} (sec^{-1})

K_{Mn2} = taxa de oxidação do Mn^{+2} (sec^{-1})

K_{CH4} = taxa de oxidação do CH_4 (sec^{-1})

K_{H2S} = taxa de oxidação do H_2S (sec^{-1})

K_{LDOM} = taxa de decaimento de LDOM (sec^{-1})

K_{RDOM} = taxa de decaimento de RDOM (sec^{-1})

K_{LPOM} = taxa de decaimento de LPOM (sec^{-1})

K_{RPOM} = taxa de decaimento de RPOM (sec^{-1})

K_{BOD} = taxa de decaimento de CBOD (sec^{-1})

K_{sed} = taxa de decaimento do sedimento (sec^{-1})

K_L = taxa de troca interfacial para o oxigênio ($m sec^{-1}$)

δ_{OMa} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para matéria orgânica de algas

δ_{OMe} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para matéria orgânica de perifíton/epifíton

δ_{OMmac} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para matéria orgânica de macrófitas

δ_{OM} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para matéria orgânica

δ_{NH4} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para nitrificação

δ_{Fe-O2} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para Fe^{+2}

δ_{Mn2-O2} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para Mn^{+2}

δ_{H2S-O2} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para H_2S

δ_{CH4-O2} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para CH_4

δ_{OMzoo} = coeficiente estequiométrico de oxigênio para zooplâncton

ϕ_{NH4} = concentração de amônia-nitrogênio ($g m^{-3}$)

ϕ_a = concentração de algas ($g m^{-3}$)

ϕ_e = concentração de perifíton/epifíton ($g m^{-3}$)

ϕ_{zoo} = concentração de zooplâncton ($g m^{-3}$)

ϕ_{macr} = concentração de macrófitas ($g m^{-3}$)

ϕ_{LDOM} = concentração de LDOM ($g m^{-3}$)

ϕ_{LPOM} = concentração de LPOM ($g m^{-3}$)

ϕ_{RDOM} = concentração de RDOM ($g m^{-3}$)

ϕ_{RPOM} = concentração de RPOM (g m^{-3})

ϕ_{BOD} = concentração de BOD (g m^{-3})

ϕ_{sed} = concentração de sedimento orgânico (g m^{-3})

ϕ_{DO} = concentração de OD (g m^{-3})

ϕ_{Fe2} = concentração de Fe reduzido (g m^{-3})

ϕ_{Mn2} = concentração de Mn reduzido (g m^{-3})

ϕ_{CH4} = concentração de CH_4 (g m^{-3})

ϕ_{H2S} = concentração de H_2S (g m^{-3})

ϕ_{SDO} = concentração de saturação de OD (g m^{-3})

A_{sed} = área da superfície do sedimento (m^2)

A_{sur} = área da superfície da água (m^2)

γ_{NH4} = fator de multiplicação da temperatura para nitrificação

γ_{OM} = fator de multiplicação da temperatura para decaimento de matéria orgânica

γ_{zoo} = fator de multiplicação da temperatura para zooplâncton

SOD = demanda de oxigênio do sedimento ($\text{g m}^{-2} \text{sec}^{-1}$)

V = volume da célula computacional (m^3)

R_{BOD} = conversão da CBOD no modelo para CBOD última

Θ = fator de multiplicação da temperatura para BOD

T = temperatura ($^{\circ}\text{C}$)

$$\begin{aligned}
S_{NH_4} = & \underbrace{\sum K_{ar}\delta_{Na}\phi_a}_{\text{respiração de algas}} + \underbrace{\sum (K_{ag}\delta_{Na}\phi_a P_{NH_4})}_{\text{crescimento de algas}} + \underbrace{\sum K_{er}\delta_{Ne}\phi_e}_{\text{respiração de epifíton}} + \underbrace{\sum K_{eg}\delta_{Ne}\phi_e P_{NH_4}}_{\text{crescimento de epifíton}} \\
& - \underbrace{K_{RPOM}\delta_{N-OM}\gamma_{OM}\phi_{RPOM}}_{\text{decaimento de RPOM}} - \underbrace{K_{LPOM}\delta_{N-OM}\gamma_{OM}\phi_{LPOM}}_{\text{decaimento de LPOM}} - \underbrace{K_{LDOM}\gamma_{OM}\delta_{N-OM}\phi_{LDOM}}_{\text{decaimento de LDOM}} \\
& - \underbrace{K_{RDOM}\delta_{N-OM}\gamma_{OM}\phi_{RDOM}}_{\text{decaimento de RDOM}} - \underbrace{K_s\delta_{N-OM}\gamma_{N-OM}\phi_{sed}}_{\text{decaimento de 1a ordem do sedimento}} - \underbrace{SOD_{NH_4}\gamma_{OM}\frac{A_{sed}}{V}}_{\text{decaimento de ordem 0 do sedimento}} \\
& - \underbrace{\sum K_{CBOD}R_{CBOD}\delta_{N-CBOD}\Theta^{T-20}\phi_{CBOD}}_{\text{decaimento de CBOD}} - \underbrace{K_{NH_4}\gamma_{NH_4}\phi_{NH_4}}_{\text{nitrificação}} \\
& + \underbrace{\sum (K_{mr} - (1 - f_{nsed})K_{mg})\delta_{N-m}\phi_{macro}}_{\text{produção líquida por macrófitas}} - \underbrace{\sum K_{zr}\delta_{N-z}\phi_{zoo}}_{\text{respiração de zooplâncton}} \quad (A.2)
\end{aligned}$$

Para evitar repetição, as variáveis descritas a seguir serão apenas as que diferem da Equação A.1. Assim:

S_{NH_4} = variação da concentração de amônia ($\text{g m}^{-3} \text{sec}^{-1}$)

δ_{N-a} = coeficiente estequiométrico de nitrogênio para algas

δ_{N-e} = coeficiente estequiométrico de nitrogênio para perifíton/epifíton

δ_{N-m} = coeficiente estequiométrico de nitrogênio para macrófitas

δ_{N-OM} = coeficiente estequiométrico de nitrogênio para matéria orgânica

δ_{N-CBOD} = coeficiente estequiométrico de nitrogênio para CBOD

δ_{N-z} = coeficiente estequiométrico de nitrogênio para zooplâncton

f_{nsed} = fração de assimilação de nitrogênio do sedimento por macrófitas

P_{NH_4} = fator de preferência por amônia

SOD_{NH_4} = taxa de liberação de amônia pelo sedimento ($\text{g m}^{-2} \text{sec}^{-1}$)

$$\begin{aligned}
S_P = & \underbrace{\left(\sum (K_{ag} - K_{ar}) \delta_{Pa} \phi_a \right)}_{\text{produção líquida por algas}} + \underbrace{\sum (K_{eg} - K_{er}) \delta_{Pe} \phi_e}_{\text{produção líquida por epifíton}} - \underbrace{K_{RPOM} \delta_{P-OM} \gamma_{OM} \phi_{RPOM}}_{\text{decaimento de RPOM}} \\
& - \underbrace{K_{LPOM} \delta_{OM} \gamma_{OM} \phi_{LPOM}}_{\text{decaimento de LPOM}} - \underbrace{K_{LDOM} \gamma_{OM} \delta_{OM} \phi_{LDOM}}_{\text{decaimento de LDOM}} - \underbrace{K_{RDOM} \delta_{OM} \gamma_{OM} \phi_{RDOM}}_{\text{decaimento de RDOM}} \\
& - \underbrace{K_s \delta_{P-OM} \gamma_{OM} \phi_{sed}}_{\text{decaimento de 1ª ordem do sedimento}} - \underbrace{SOD \gamma_{OM} \frac{A_{sed}}{V}}_{\text{decaimento de ordem 0 do sedimento}} - \underbrace{\sum \gamma_{zoo} K_{zr} \delta_{Pz} \phi_{zoo}}_{\text{respiração de zooplâncton}} \\
& - \underbrace{\sum K_{CBOD} R_{CBOD} \delta_{P-CBOD} \Theta^{T-20} \phi_{CBOD}}_{\text{decaimento de CBOD}} - \underbrace{\frac{(\sum \omega_{ISS} \phi_{ISS} + \omega_{Fe} \phi_{Fe}) P_p}{\Delta Z}}_{\text{adsorção de sólidos inorgânicos}} \phi_P \\
& + \underbrace{\sum (K_{mr} - (1 - f_{psed}) K_{mg}) \delta_{N-m} \phi_{macro}}_{\text{produção líquida por macrófitas}} \quad (A.3)
\end{aligned}$$

Onde:

S_P = variação da concentração de ortofosfato ($\text{g m}^{-3} \text{sec}^{-1}$)

ΔZ = espessura da célula do modelo (m)

δ_{Pa} = coeficiente estequiométrico de fósforo para algas

δ_{Pe} = coeficiente estequiométrico de fósforo para perifíton/epifíton

δ_{Pm} = coeficiente estequiométrico de fósforo para macrófitas

δ_{P-OM} = coeficiente estequiométrico de fósforo para matéria orgânica

δ_{P-CBOD} = coeficiente estequiométrico de fósforo para CBOD

δ_{Pz} = coeficiente estequiométrico de fósforo para zooplâncton

f_{psed} = fração de assimilação de fósforo do sedimento por macrófitas

ω_{ISS} = velocidade de sedimentação de sólidos suspensos inorgânicos (m sec^{-1})

ω_{Fe} = velocidade de sedimentação de sólidos orgânicos particulados (m sec^{-1})

ϕ_{ISS} = concentração de sólidos suspensos inorgânicos (g m^{-3})

$$\begin{aligned}
S_a = & \underbrace{\sum (K_{ag}\phi_a)}_{\text{crescimento}} - \underbrace{\sum (K_{ar}\phi_a)}_{\text{respiração}} - \underbrace{K_{ae}\phi_a}_{\text{excreção}} - \underbrace{K_{am}\phi_a}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{\omega_a \frac{\delta\phi_a}{\delta z}}_{\text{sedimentação}} \\
& - \underbrace{\sum (Z_\mu\phi_{zoo} \frac{\sigma_{alg}\phi_a}{\sum \sigma_{alg}\phi_a + \sigma_{pom}\phi_{lpom} + \sum \sigma_{zoo}\phi_{zoo}})}_{\text{perda líquida por predação}} \quad (\text{A.4})
\end{aligned}$$

Onde:

z = altura da célula (m)

Z_μ = taxa de crescimento líquido de uma espécie de zooplankton

$\sigma_{alg}, \sigma_{zoo}$ = preferência de predação pelo zooplankton, por algas (alg) ou zooplankton (zoo)

ω_a = sedimentação de algas (m sec^{-1})

Apêndice B Perfis de temperatura após primeira calibração hidrodinâmica

Perfis simulados de temperatura

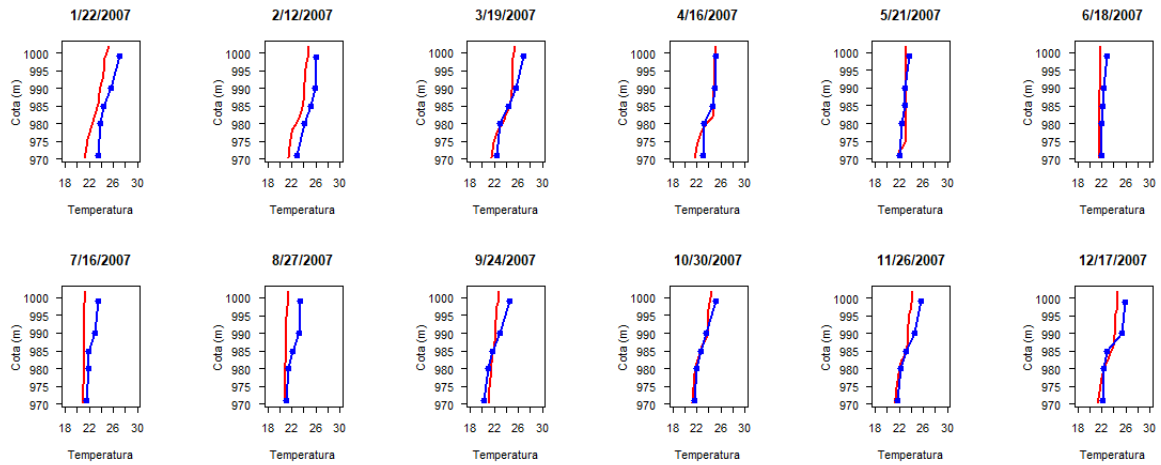


Figura B.1: Perfis de temperatura simulada (linha vermelha) e observada (linha azul) para o ano de 2007.

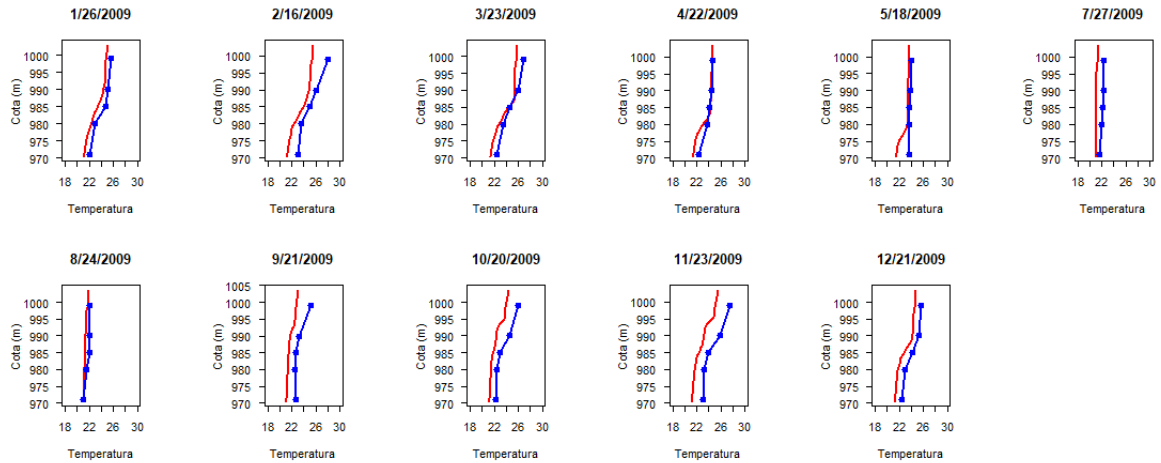


Figura B.2: Perfis de temperatura simulada (linha vermelha) e observada (linha azul) para o ano de 2009.

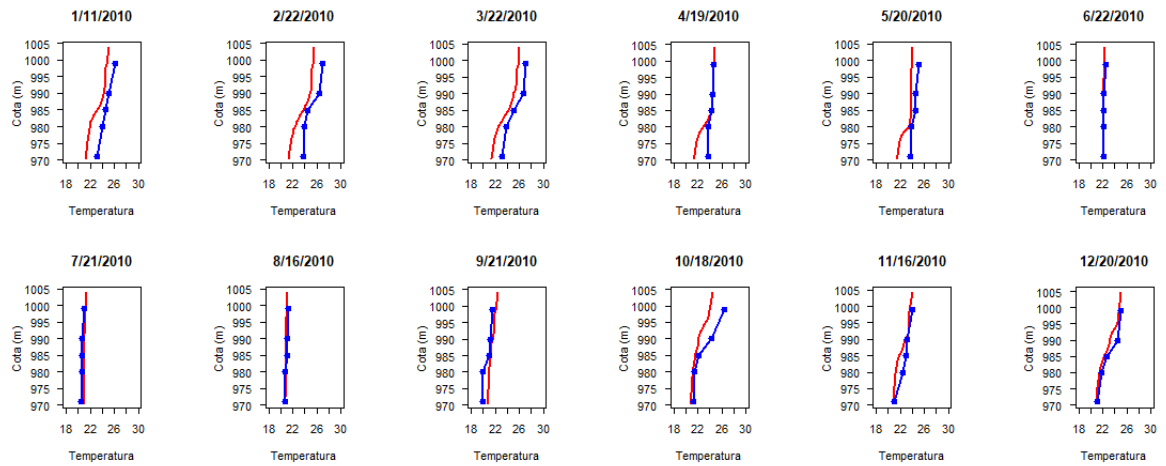


Figura B.3: Perfis de temperatura simulada (linha vermelha) e observada (linha azul) para o ano de 2010.

Apêndice C Séries temporais das condições de contorno de qualidade

Condições de contorno de entrada nos corpos d'água

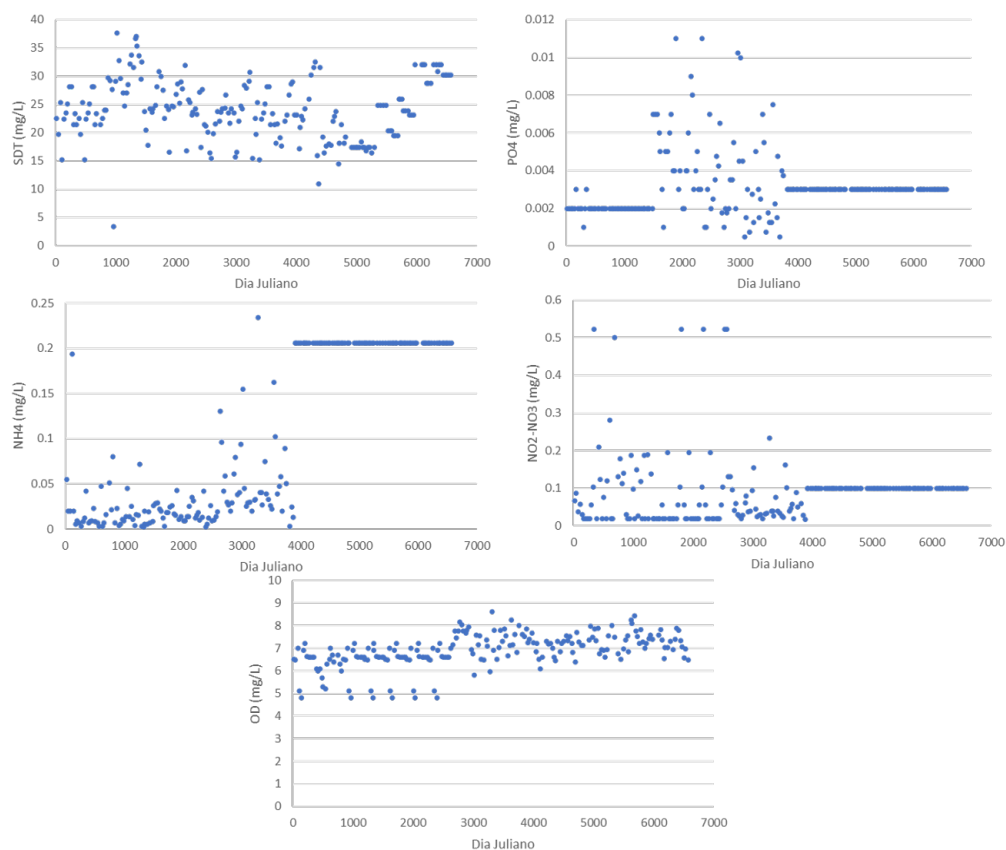


Figura C.1: Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , NO_2 - NO_3 e OD no corpo hídrico Bananal.

Condições de contorno de entrada distribuída nos corpos d'água

Condições de contorno de entrada nos tributários (ETE Norte, ETE Sul e Córrego Cabeça de Veado)

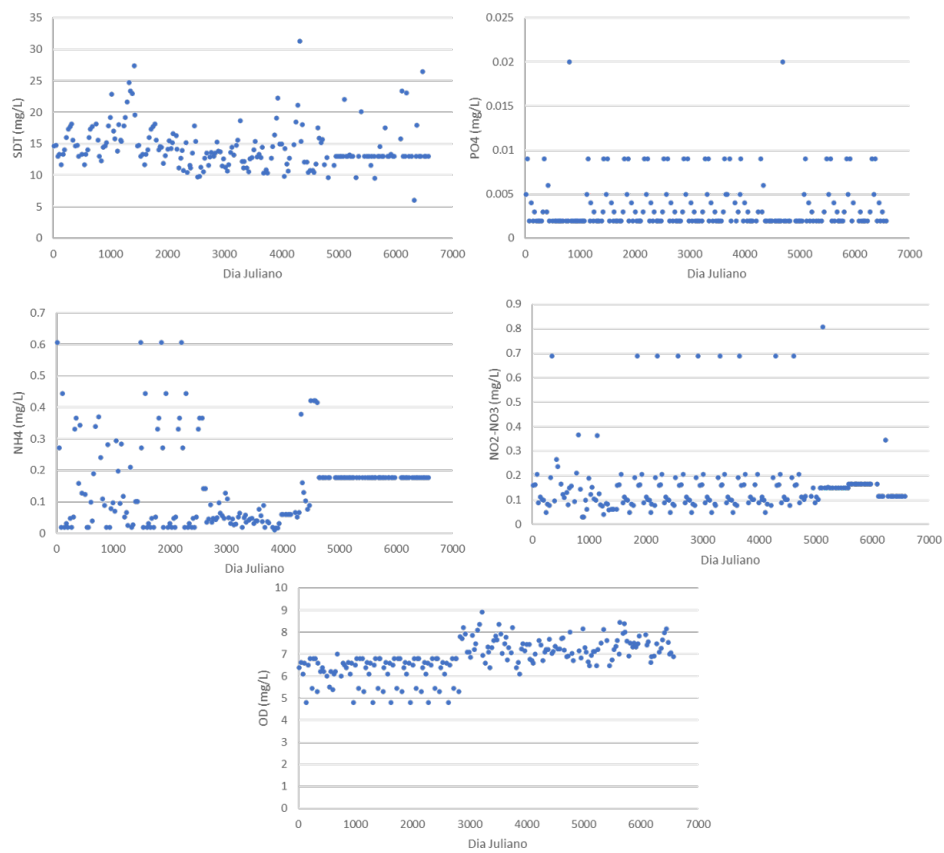


Figura C.2: Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , $\text{NO}_2\text{-NO}_3$ e OD no corpo hídrico Gama.

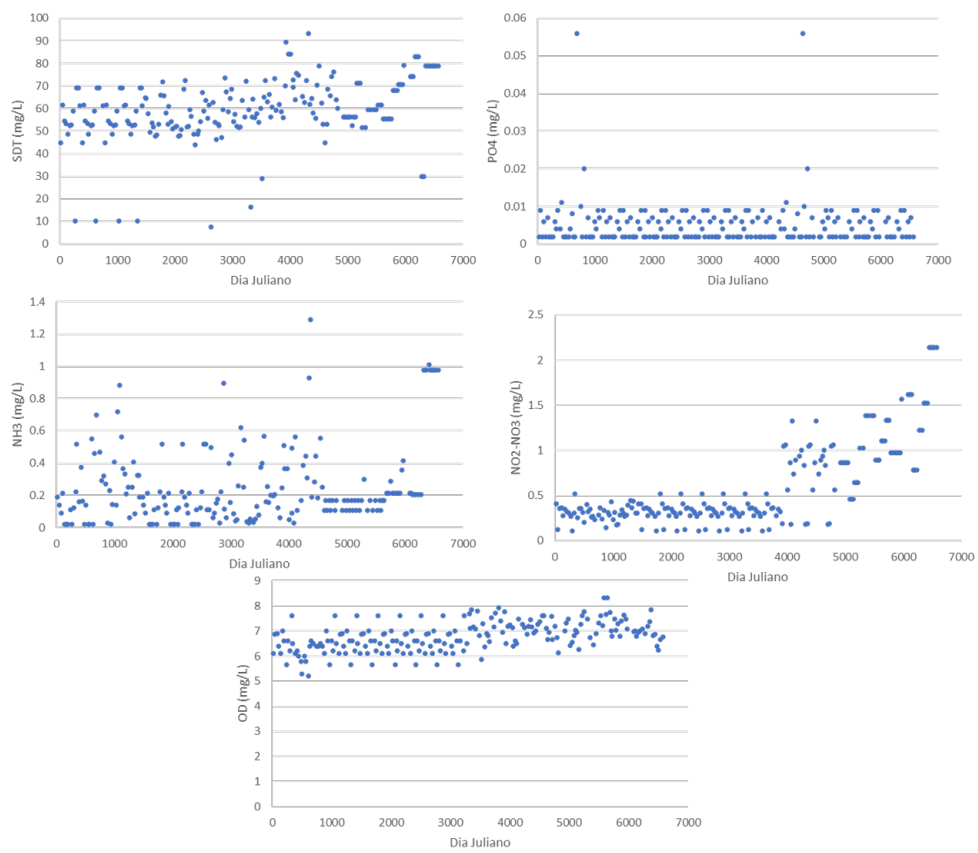


Figura C.3: Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO₄, NH₄, NO₂-NO₃ e OD no corpo hídrico Riacho Fundo.

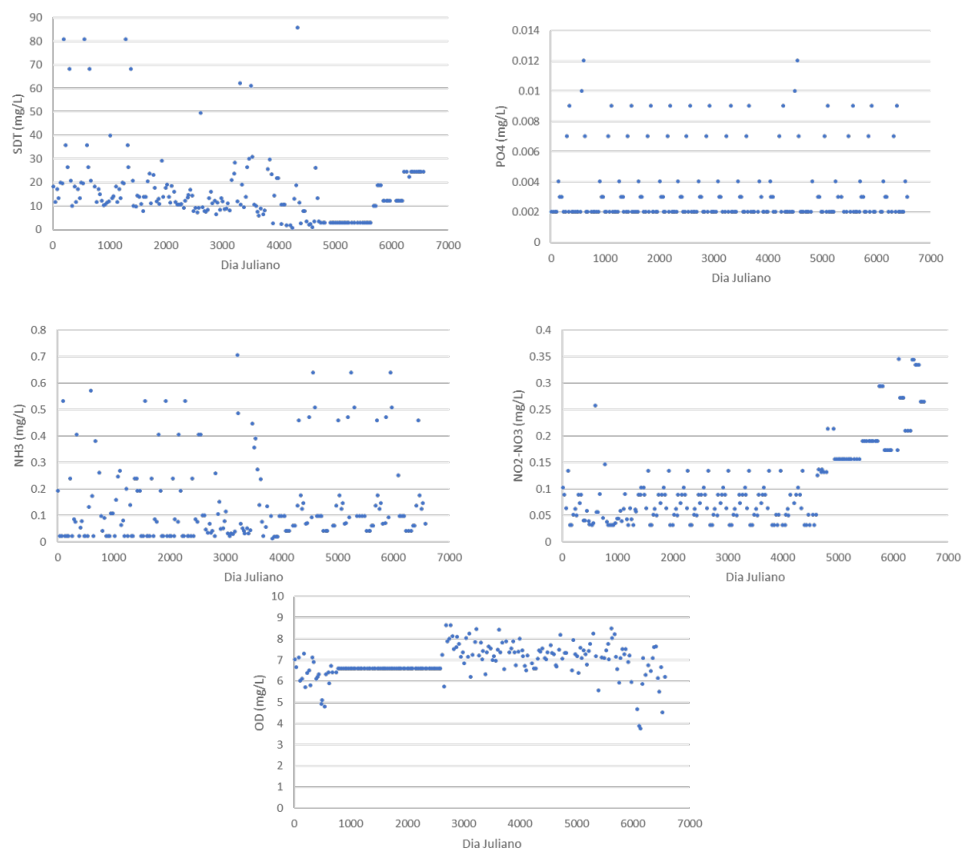


Figura C.4: Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , NO_2 - NO_3 e OD no corpo hídrico Torto.

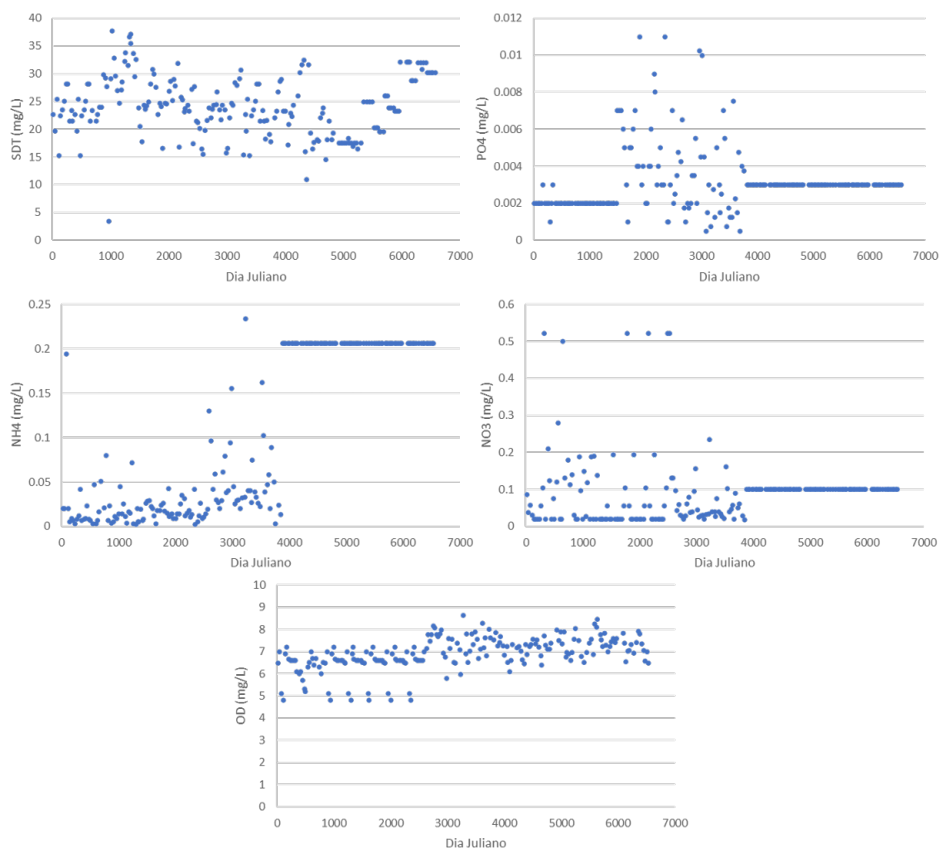


Figura C.5: Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO₄, NH₄, NO₂-NO₃ e OD no corpo hídrico Bananal.

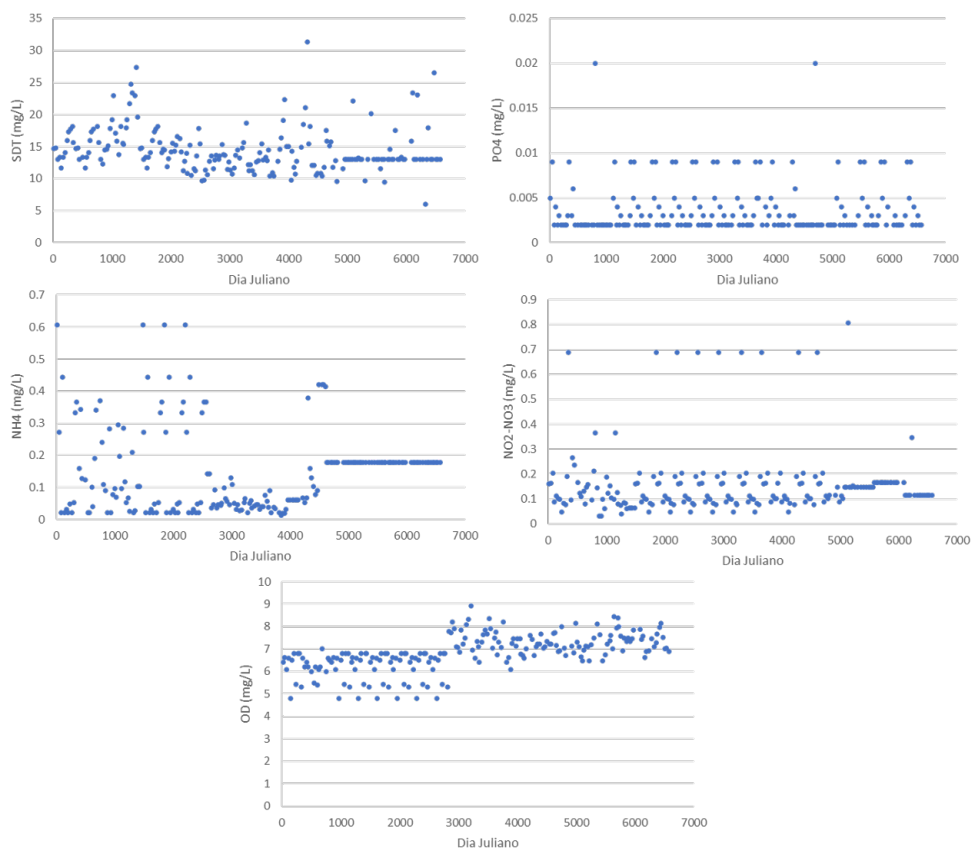


Figura C.6: Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , $\text{NO}_2\text{-NO}_3$ e OD no corpo hídrico Gama.

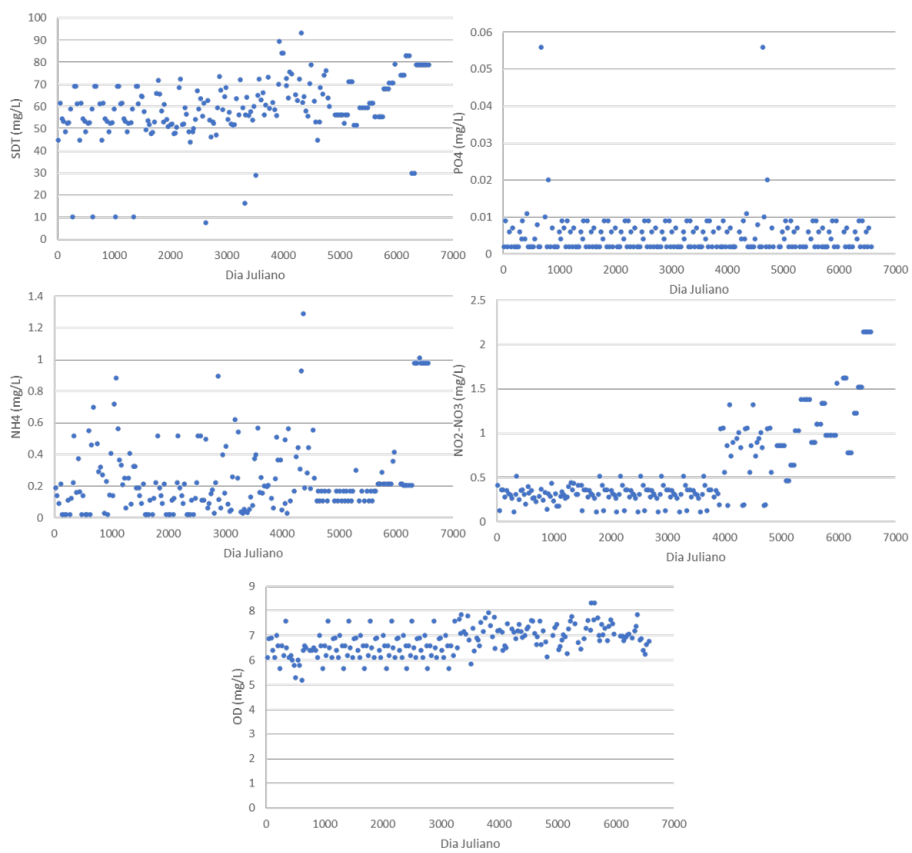


Figura C.7: Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO₄, NH₄, NO₂-NO₃ e OD no corpo hídrico Riacho Fundo.

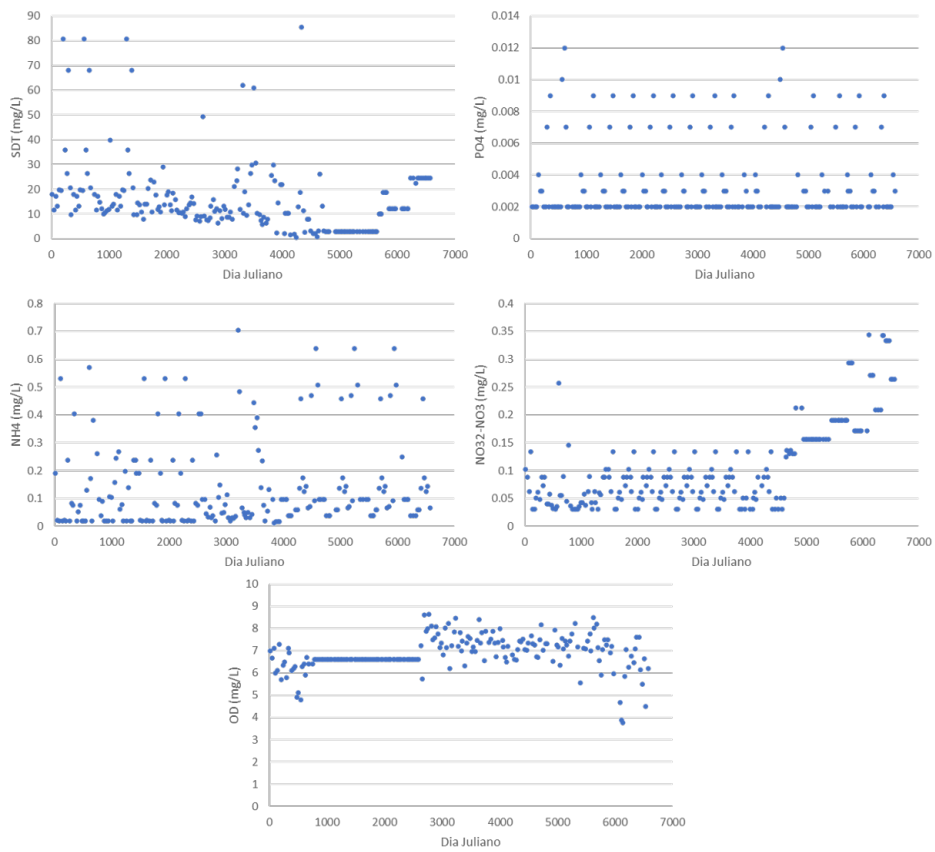


Figura C.8: Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , NO_2-NO_3 e OD no corpo hídrico Torto.

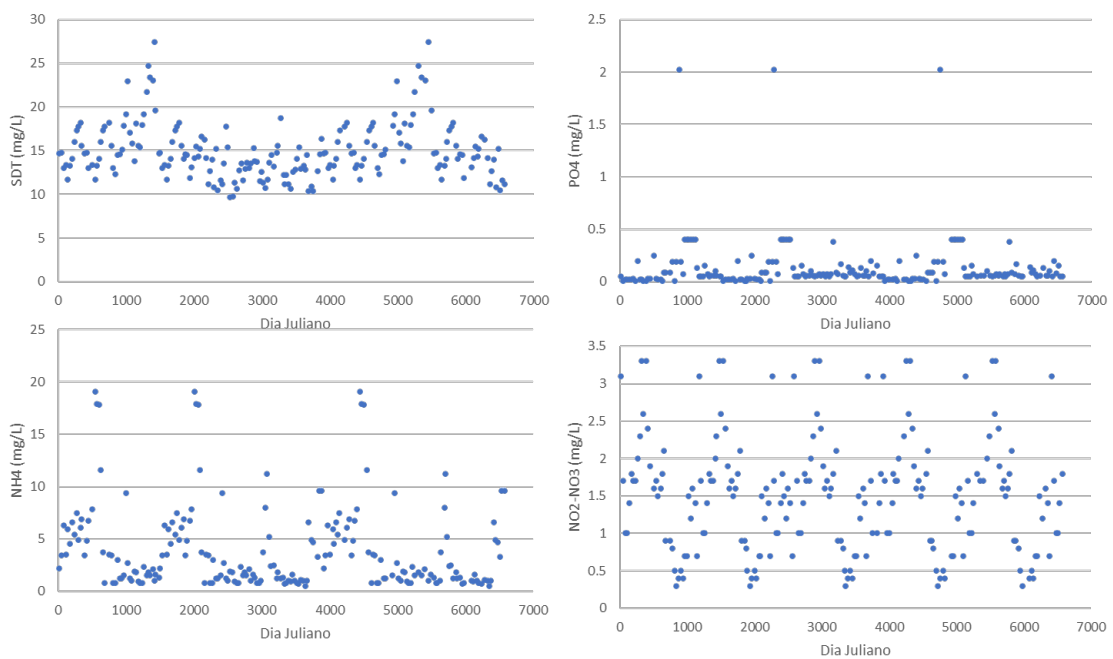


Figura C.9: Série temporal dos dados de entrada para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , NO_2-NO_3 da ETE Norte.

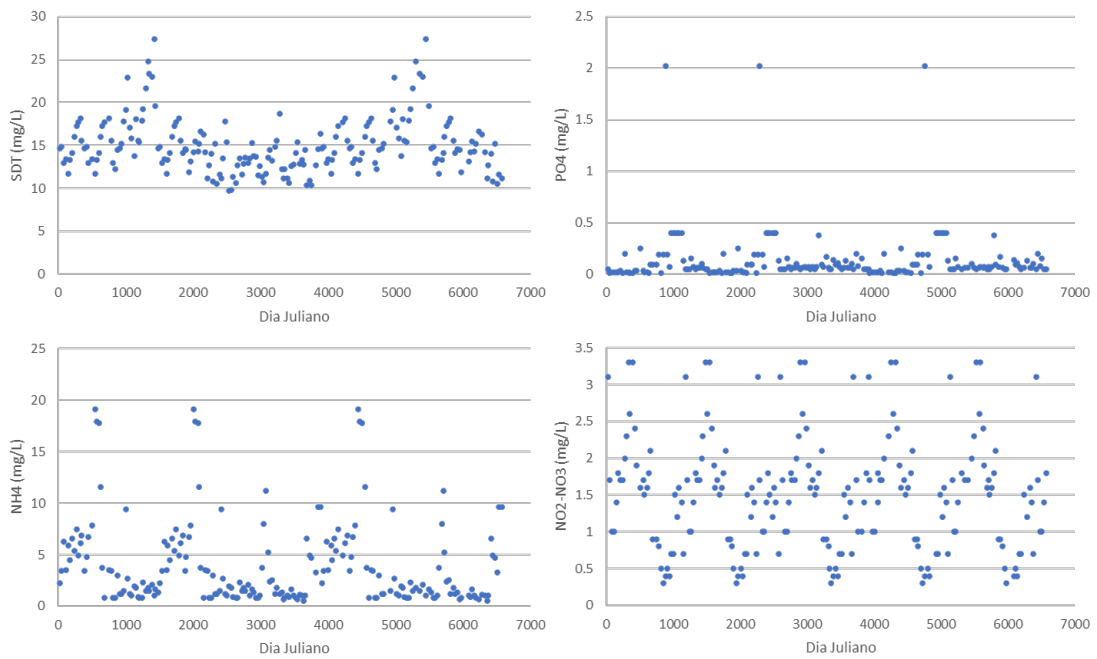


Figura C.10: Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , NO_2 - NO_3 da ETE Sul.

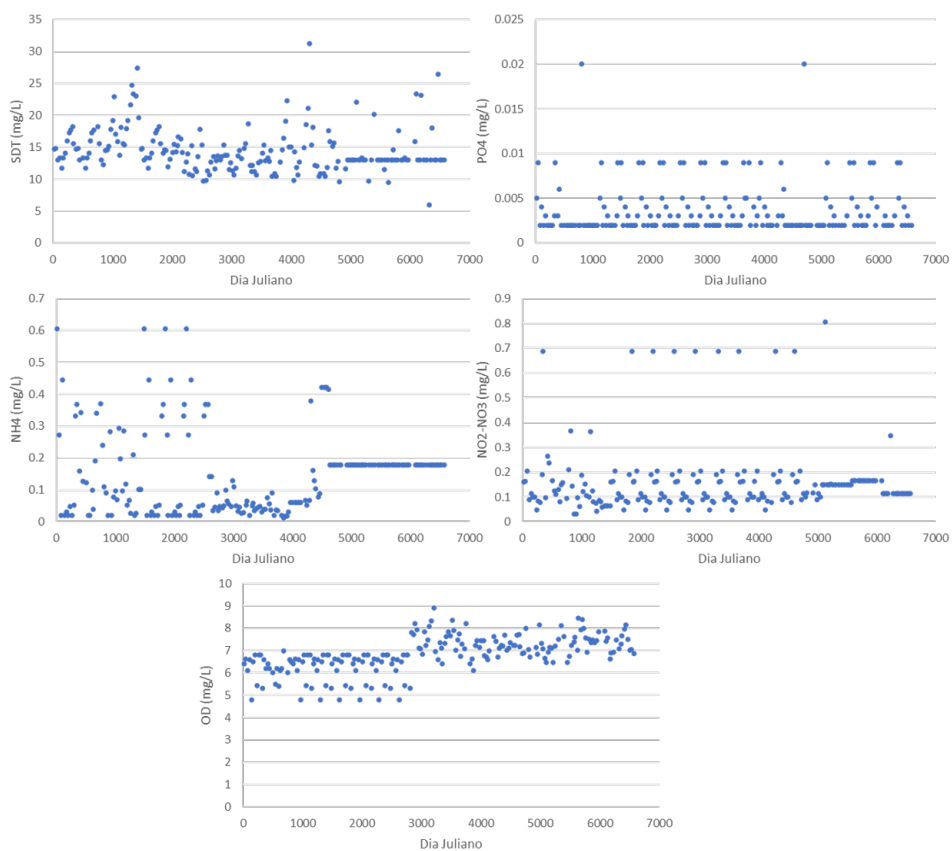


Figura C.11: Série temporal dos dados de entrada distribuída para Sólidos Dissolvidos Totais (SDT), PO_4 , NH_4 , NO_2 - NO_3 e OD do tributário Córrego Cabeça de Veado

Apêndice D Código das principais funções da rotina computacional utilizada

O código completo desenvolvido por Barros (2019) e adaptado neste trabalho conta com aproximadamente 3000 linhas devido à escrita do arquivo “w2-con”, arquivo de texto que é lido pelo CE-QUAL-W2 e conta com toda a configuração do modelo e, portanto, bastante extenso. Por isso, o código foi resumido neste apêndice apenas para demonstrar o funcionamento das principais funções do arquivo de calibração.

Assim, segue abaixo:

- Função `__init__`: inicia o calibrador e recebe o caminho dos arquivos necessários para rodar o modelo (“w2-con” e “wsc”), os arquivos com os dados observados, os arquivos de saída do modelo e o nome da variável a ser analisada.
- Função `paramcontrol`: função onde são informadas as variáveis de decisão, assim como o intervalo e melhor chute para calibração do modelo.
- Função `simulation`: função que roda o CE-QUAL-W2 até ser atingido o número de iterações especificado no módulo principal, e confere caso haja algum erro na escrita do arquivo “w2-con” (os espaços para os parâmetros precisam ter 8 caracteres, por exemplo). Nessa função, também é escrita o arquivo “w2-con”, que será modificado a cada iteração.
- Função `evaluation`: nessa função o arquivo com os dados observados são lidos, tratados e salvos em uma lista para ser utilizado na função `objectivefunction`.
- Função `objectivefunction`: função que calcula o valor da função objetivo através da função de mesmo nome do módulo `spotpy`. Neste caso, como a função escolhida foi o Nash-Sutcliffe, a função chamada é a `spotpy.objectivefunctions.nashsutcliffe`.

```
class spot_setup(object):  
    def __init__(self):
```

```

self.w2_file = 'w2_con.npt'
self.wsc_file = 'Inputs\\Clima\\wsc.csv'
self.evaluation_file = 'Alg_EstC_2000-2010_2.csv' #MUST BE
    A CSV FILE WITH COLUMNS [Date, Data] IN THIS WORK >> [
    DATE, 0m, 1m, 5m, 10m, 15m]
self.result_path = 'Resultados\\'
self.result_file = ['time_series_1_2_seg14.opt', '
    time_series_1_4_seg14.opt', 'time_series_1_5_seg14.opt',
    'time_series_1_6_seg14.opt', 'time_series_1_7_seg14.opt
    ']
self.assessed_variables = ['    ATOT']

def paramcontrol(name, calibrate, value, low, high, guess):
    '''
    name = Parameter or setting name,
    calibrate = boolean, True if the parameter must be
        calibrated (value will be not used)
    value = if calibrate = False, value will be inputed to
        the parameter field
    low = minimum value for calibration purposes
    high = maximum value for calibration purposes
    guess = optimum guess for calibration purposes'''

    d = {'calibrate': calibrate,
        'value': value,
        'param': spotpy.parameter.Uniform(name, low=
            low, high=high, optguess=guess)
        }
    return d

#paramname_paramvalue = [[], []]
self.paramname_paramvalue = {}
self.params = []

self.w2con_settings = {
    'wind_shelter_coef' : paramcontrol('WSC', False,
        '0.72000', 0.1, 2.0, 0.6),

    {...}

def simulation(self, x):
#Runs CE-QUAL-W2
    for i in range(len(x)):
        value = str(x[i])
        while True:
            if len(value) >= 7 and '.' in value:
                if value.replace(".", "", 1).isdigit():
                    value = value[:7]
                    break
                else:
                    break
            else:
                if '.' in value and value.isdigit():
                    value = value + '0'
                elif value.isdigit():
                    value = value + '.'
                else:
                    break

        self.paramname_paramvalue[self.paramnames[i]] = value

```

```

errorparameter = []
for k, v in self.paramname_paramvalue.items():
    if len(v) != 7:
        if v == 'ULTIMATE':
            continue
        errorparameter.append(k)
for item in errorparameter:
    print('Please CHECK the parameter ' + item + ' because
          its length MUST BE 7 characters!!')

w2_connpt = ''' PSU W2 Model Version 3.7

(...)

def evaluation(self):
    evaluation = []
    with open(self.evaluation_file) as f:
        csv_reader = csv.reader(f)
        try:
            dates = [datetime.strptime(row[0], '%m/%d/%Y') for
                    row in csv_reader]
        except:
            try:
                dates = [datetime.strptime(row[0], '%d/%m/%Y')
                        for row in csv_reader]
            except:
                raise Exception('Make sure data is formatted dd
                                /mm/YYYY or mm/dd/YYYY')
    startdate = datetime(int(self.w2con_settings['year']['value
    ']), 1, 1)
    for j in range(len(self.result_file)):
        evals = list(np.genfromtxt(self.evaluation_file,
                                   delimiter=',')[:, j+1])
        evaluation_date = []
        evaluation_data = []
        for i in range(len(dates)):
            if dates[i] >= startdate + timedelta(float(self.
                paramname_paramvalue['TMSTRT'])) and dates[i] <=
                startdate + timedelta(float(self.
                paramname_paramvalue['TMEND'])):
                evaluation_date.append(dates[i])
                evaluation_data.append(evals[i])
        evaluation.append(evaluation_data)

return evaluation

def objectivefunction(self, simulation, evaluation, params=
    None):
    likes = []
    evaluation_all = []
    simulation_all = []
    for i in range(len(evaluation)):
        for j in range(len(evaluation[i])):
            if np.isnan(evaluation[i][j]):
                continue
            else:
                simulation_all.append(simulation[i][j])
                evaluation_all.append(evaluation[i][j])

```

```

like_tog = spotpy.objectivefunctions.nashsutcliffe(
    evaluation_all, simulation_all)
return like_tog

```

O módulo principal que chama esta função (aqui importada como “*spot_setup*”), executa o CE-QUAL-W2, configura as condições de calibração conforme descrito na seção 4.6, além de gerar o banco de dados com os resultados, segue abaixo.

```

if __name__ == "__main__":
    spot_setup=spot_setup()
    eval_data_len = len(spot_setup.evaluation()) #Length of the
        evaluation data

    #Select number of maximum repetitions
    rep=300
    sampler=spotpy.algorithms.sceua(spot_setup, dbname='CQW2_DB',
        db_precision=np.float64, dbformat='csv', dbappend=False,
        backup_every_rep=1)
    sampler.sample(repetitions=rep, ngs=12, kstop=100, pcento=0.001,
        peps=0.01)

```

Apêndice E Perfis de concentração de OD

Perfis simulados de OD

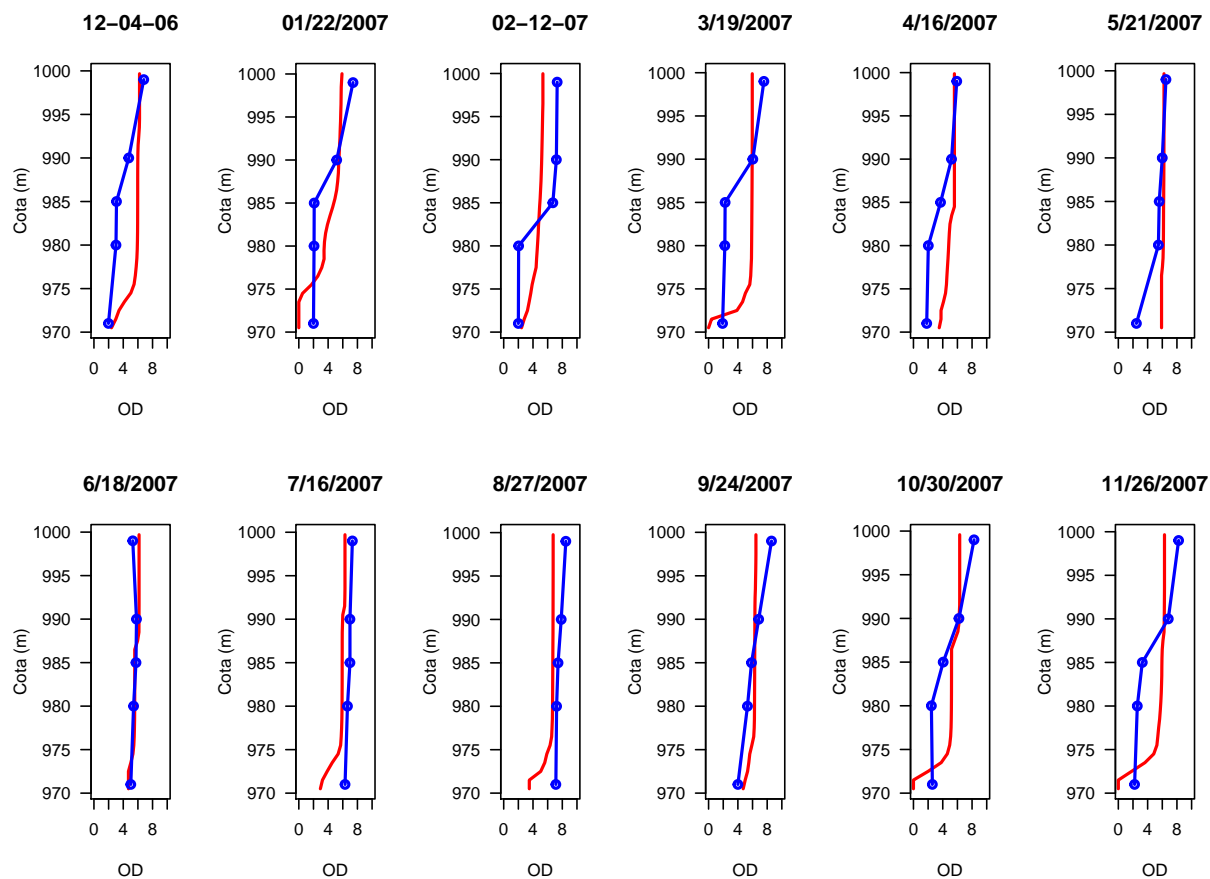


Figura E.1: Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2007.

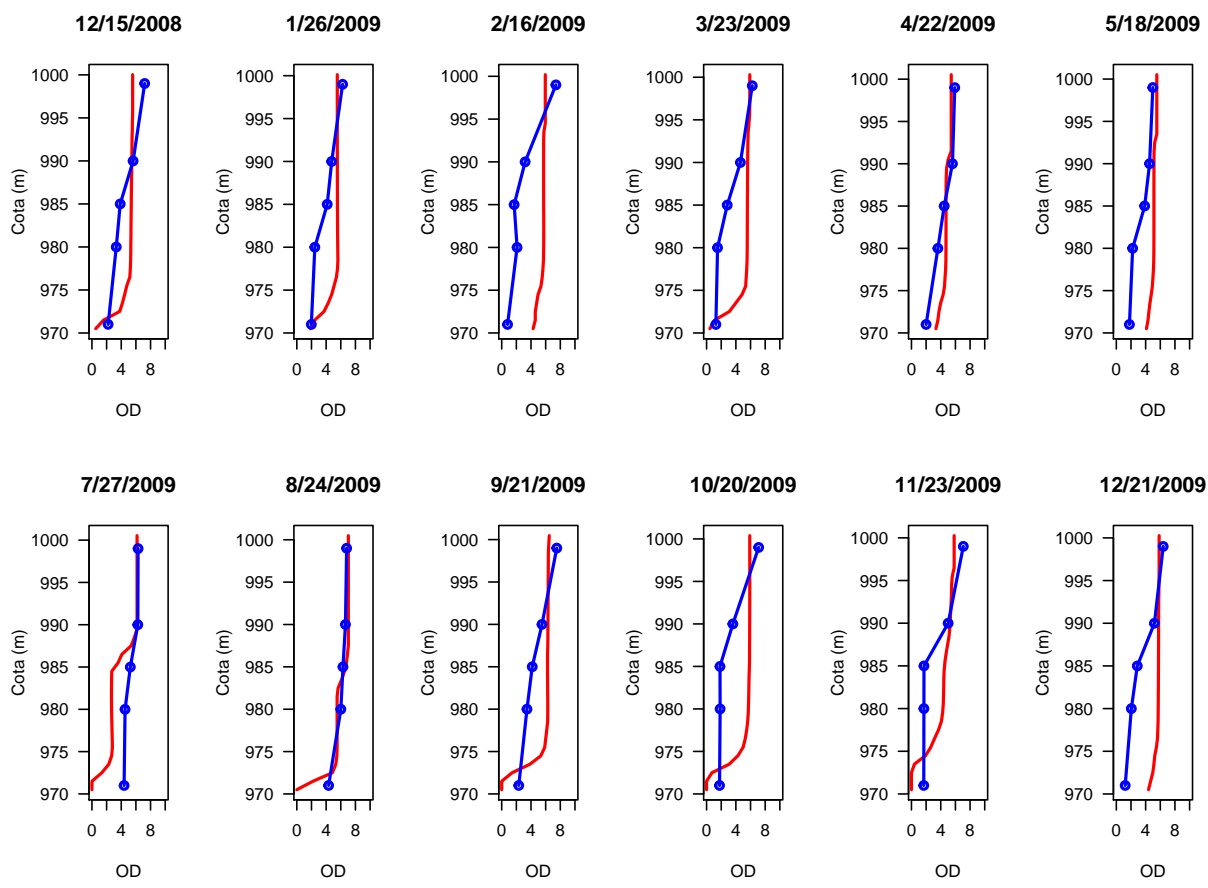


Figura E.2: Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2009.

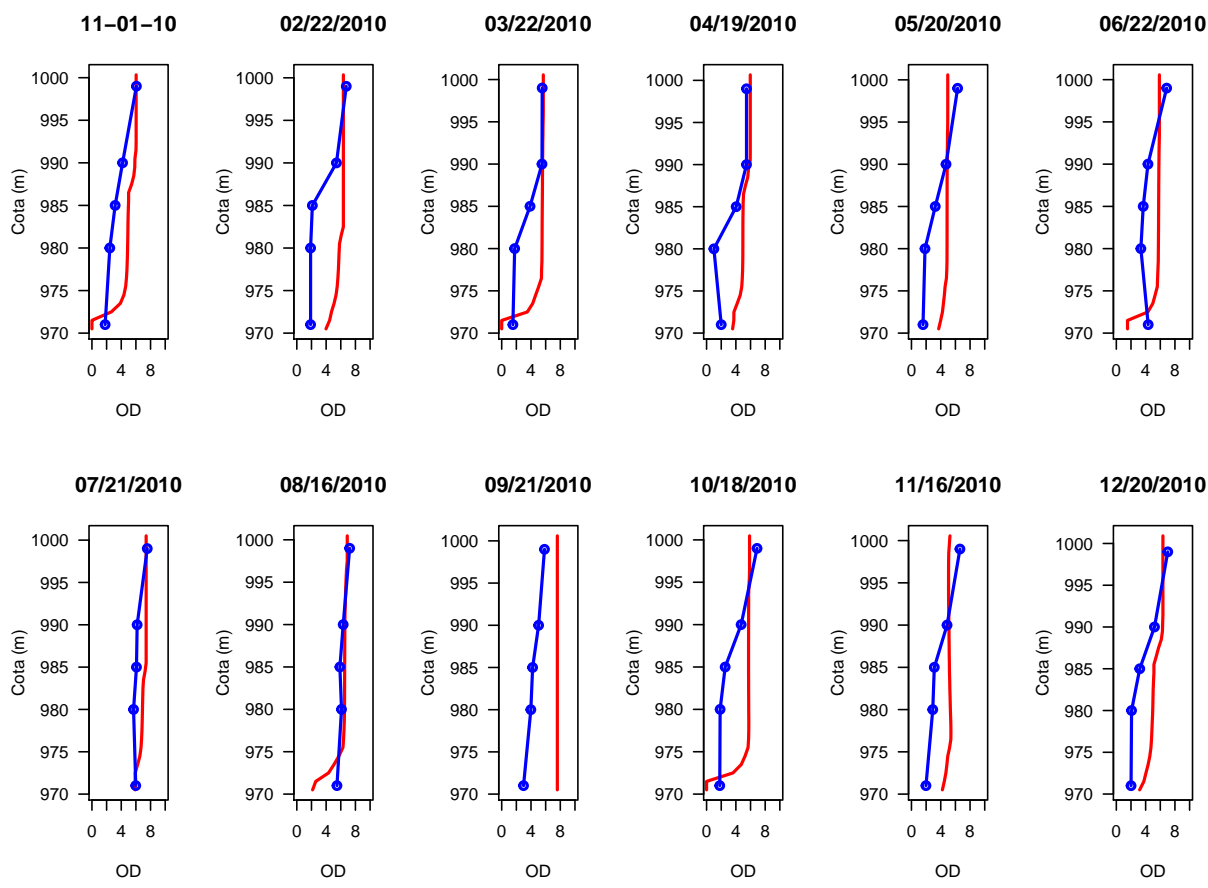


Figura E.3: Perfis de Oxigênio Dissolvido simulado (linha vermelha) e observado (linha azul) para o ano de 2010.

Apêndice F Resultados da segunda calibração do módulo de qualidade da água

Valores encontrados após segunda calibração do módulo de qualidade da água

Tabela F.1: Parâmetros encontrados na segunda simulação do módulo de qualidade de água, com novo conjunto de parâmetros hidrodinâmicos.

Parâmetro	Valor encontrado
SOD	5.39 g/m ² /dia
SODT1	7.42 °C
SODT2	21.76 °C
PO4R	0.036 g/m ² /day
SSS	14.43 m/dia
NO3DK	0.76 /dia
NH4DK	0.003 /dia
NO3S	0.35 m/dia
NH4R	0.09 g NH ₄ -N/m ² /dia
AE	0.04 /dia
AR	0.03 /dia
AG	4.34 /dia
AM	0.012 /dia
AS	0.29 /dia

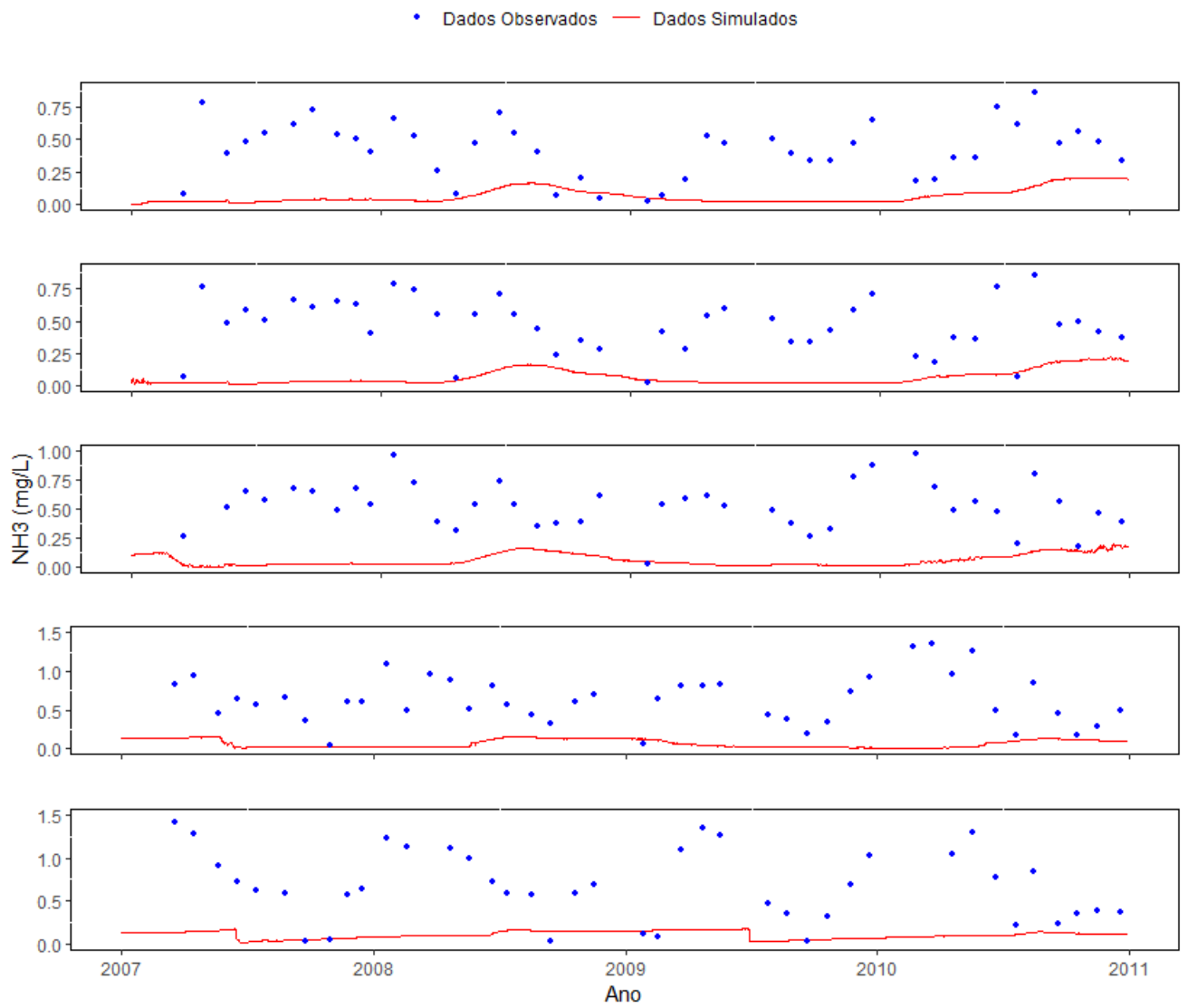


Figura F.1: Série temporal de NH_4 simulado (linha vermelha) e observado (pontos azuis) para as 5 profundidades.

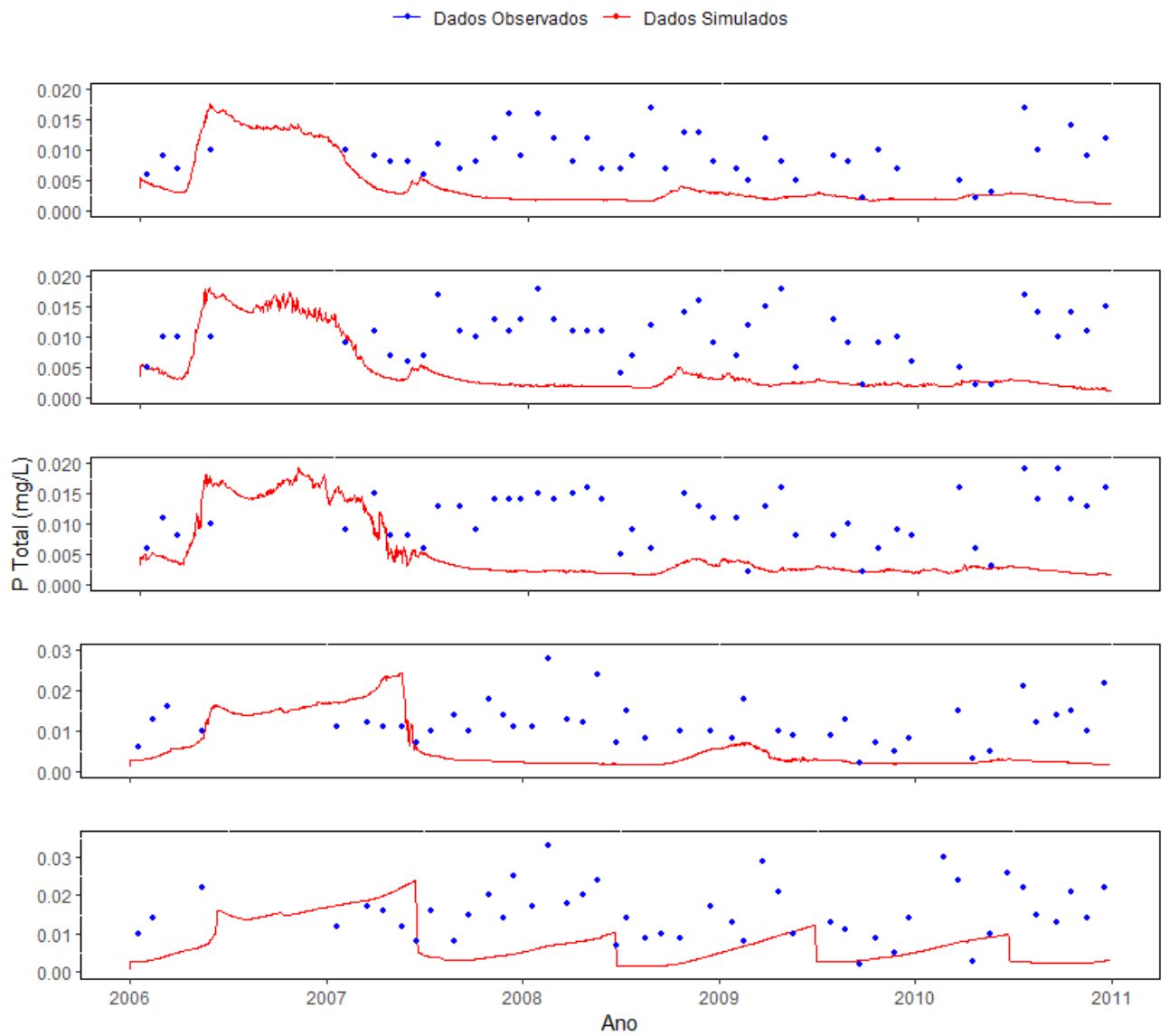


Figura F.2: Série temporal de Fósforo Total simulado (linha vermelha) e observado (pontos azuis) para as 5 profundidades.