

Mariella Janette Berrocal Tito

**Estimativa de Parâmetros
Utilizados em um Modelo de Multimeios-
Aplicação na Baía de Guanabara**

TESE DE DOUTORADO

**DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA DOS
MATERIAIS E METALURGIA**
Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Metalúrgica

Rio de Janeiro
Junho de 2003

**PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO**



Mariella Janette Berrocal Tito

**ESTIMATIVA DE PARÂMETROS
UTILIZADOS EM UM MODELO DE MULTIMEIOS-
APLICAÇÃO NA BAÍA DE GUANABARA**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica do Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia da PUC-Rio, como parte dos requisitos parciais para obtenção do título de Doutor em Metalurgia.

Orientador: Roberto José de Carvalho

Co-orientador: Nilson Costa Roberty

**Rio de Janeiro
Junho 2003**



Mariella Janette Berrocal Tito

**Estimativa de Parâmetros Utilizados em
um Modelo de Multimeios - Aplicação na
Baía de Guanabara**

Tese apresentada ao programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica do Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia como parte dos requisitos parciais para obtenção do título de Doutor em Metalurgia. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada

Prof. Roberto José de Carvalho

Orientador
Departamento de Metalurgia - PUC-Rio

Prof. Nilson Costa Roberty

Co-orientador
COPPE- UFRJ

Prof. Haroldo F. de Campos Velho

LAC-INPE

Prof. Helio Marques Kohler

Departamento de Metalurgia - PUC-Rio

Prof. Antônio José da Silva Neto

IPRJ – UERJ

Prof. Francisco José da Cunha Pires Soeiro

Departamento de Engenharia Mecânica –UERJ

Prof. Ney Augusto Dumont

Coordenador Setorial do Centro
Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 2 de Junho de 2003

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, da autora e do orientador.

Mariella Janette Berrocal Tito

Graduou-se em Física na UNMSM (Universidad Nacional Mayor de San Marcos) em 1990. cursou Mestrado em Energia Nuclear na UNI (Universidad Nacional de Ingeniería), 1994. Trabalhou no Instituto Politécnico Carlos Cueto Fernandini 1997-1998. Participou em diferentes congressos relacionados com problemas inversos.

Ficha Catalográfica

Tito, Mariella Janette Berrocal

Estimativa de parâmetros utilizados em um modelo de multimeios : aplicação na Baía de Guanabara / Mariella Janette Berrocal Tito; orientador: Roberto José de Carvalho ; co-orientador: Nilson Costa Roberty. – Rio de Janeiro : PUC, Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia, 2003.

165 f . : il. ; 30 cm

Tese (doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia.

Inclui bibliografia.

1. Ciência dos Materiais e Metalurgia – Teses. 2. Problemas inversos. 3. Modelo de multimeios. 4. Hidrocarbonetos. 5. Baía de Guanabara. 6. Máxima entropia generalizada. I. Carvalho, Roberto José de. II. Roberty, Costa Nilson. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia. III. Título.

CDD: 669

A Fortunato Berrocal Díaz
“Eres parte de nuestra historia,
compartistes nuestra vida.
Saber que estás en algún lugar me
ayuda a no sentir tristeza ni soledad”.

Agradecimentos

Aos professores Roberto José de Carvalho e Nilson Costa Roberty pela orientação, ao longo de nossa agradável convivência, e pela confiança em mim depositada.

Ao CNPq e à PUC-Rio, pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado.

Aos professores que participaram da comissão examinadora.

A todos os professores e funcionários do Departamento pelos ensinamentos e pela ajuda.

A todos os amigos e familiares que de uma forma ou de outra me estimularam ou me ajudaram.

Ao Brasil, pela oportunidade, “muchas gracias”.

Resumo

Berrocal, Mariella Janette Tito; Carvalho, Roberto José de (Orientador); Roberty, Nilson Costa (Co-orientador). **Estimativa de Parâmetros Usados em um Modelo de Multimeios – Aplicação na Baía de Guanabara**. Rio de Janeiro: 2003. 165p. Tese de doutorado. Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O tratamento de ambientes contaminados e a elaboração de programas de monitoramento requerem estimativas dos níveis de concentrações das substâncias, bem como um conhecimento de seu destino, taxa de transporte e tempos de residência. Na ausência de dados obtidos através de monitoramento, modelos ambientais constituem freqüentemente o único modo capaz de prever as concentrações aproximadas dos contaminantes nos compartimentos (meios) que formam o ambiente. A aplicação do modelo ambiental de multimeios “**Quantitative Water Air Sediment Interaction**” (QWASI) a um determinado ambiente exige conhecer parâmetros relacionados à área em estudo e aos contaminantes. Para o caso da Baía de Guanabara, muitos desses parâmetros não estão disponíveis. Desse modo, eles serão aproximados com técnicas do problema inverso a partir das concentrações de contaminantes medidas no sedimento e no mexilhão perna-perna. Entre os parâmetros estimados estão as emissões de 10 hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs) nas águas da Baía de Guanabara. Este trabalho também apresenta simulações da evolução da concentração de alguns hidrocarbonetos em função do tempo considerando uma emissão inicial de um HPA em um ponto arbitrário da Baía de Guanabara.

Palavras-chave

Problemas Inversos, Modelo de Multimeios, Hidrocarbonetos, Baía de Guanabara, Máxima Entropia Generalizada.

Abstract

Berrocal, Mariella Janette Tito; Carvalho, Roberto José de (Advisor); Roberty, Nilson Costa (Advisor). **Estimative of Parameters Used in a Multimedia Environmental Model – Application to Guanabara Bay.** Rio de Janeiro, 2003. 165p. DSc. These - Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The treatment of polluted environments and the elaboration of monitoring programs request estimates of the levels of concentrations of the substances, as well as a knowledge of its destiny, rates of transport and times of residence. In the absence of data obtained through monitoring, environmental models often provide the only way to predict the approximate concentrations of the pollutants in the compartments (media) that form the environmental. The application of the multimedia environmental model "**Quantitative Water Air Sediment Interaction**" (QWASI) to a certain environment demands the knowledge of parameters related to the area in study and to the pollutants. For the case of the Guanabara Bay, many of those parameters are not available. Therefore, they will be approximated with inverse problem techniques starting from the measured concentrations of pollutants in the sediment and in the mussel *perna-perna*. Among the estimated parameters are the emissions of 10 polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in the waters of the Guanabara Bay. This work also presents simulations of the evolution of the concentration of some hydrocarbons in function of the time considering an initial emission of a PAH in an arbitrary point of the Guanabara Bay.

Keywords

Inverse problems, Multimedia Environmental Model, Hydrocarbons, Guanabara Bay, Generalized Maximum Entropy.

Sumário

1. Introdução	21
2. Os modelos ambientais de multimeios	25
3. Os hidrocarbonetos e a importância de seu estudo no ambiente	29
4. A Baía de Guanabara	35
5. O problema direto	40
5.1 Formulação e solução matemática do problema direto no regime estacionário	42
5.2 A bioconcentração e a bioacumulação em organismos marinhos para a predição da concentração de contaminantes na água	47
5.3 Formulação matemática do problema direto no regime transiente	50
6. O problema inverso	55
6.1 Formulação matemática do problema inverso	56
6.2 O método de Máxima Entropia Generalizada	59
6.3 O método de Mínimos Quadrados	65
7. Resultados	69

7.1	O problema direto em regime estacionário. Validação do Algoritmo	69
7.2	O problema inverso	71
7.2.1	Resultado 1 – Caso teste com dados exatos a partir das concentrações do contaminante na água e no sedimento.	71
7.2.1.1	Obtenção dos valores B e q a serem utilizados no método de máxima entropia generalizada	71
7.2.1.2	Resultados com ruído randômico	79
7.2.2	Resultado 2 - Problema inverso. Caso 1	81
7.2.2.1	Os dados de entrada usados no problema inversos	81
7.2.2.2	Obtenção dos valores de B e q a serem utilizados no método de máxima entropia generalizada	95
7.2.2.3	Estimativa dos fatores de bioacumulação	99
7.2.2.4	Resultados com ruído randômico	102
7.2.3	Resultado 3 - Problema inverso. Caso 2	106
7.2.4	Resultado 4 - Exemplos de aplicação	107
7.2.4.1	Exemplo 1	107
7.2.4.2	Exemplo 2	110
7.2.4.3	Exemplo 3	116
7.2.4.4	Exemplo 4	123
8.	Conclusões e trabalhos futuros	126
9.	Referências bibliográficas	129

Apêndice 1	O modelo de multimeios QWASI	138
Apêndice 2	O mexilhão perna-perna	146
Apêndice 3	A entropia e a função de Bregman	149
Apêndice 4	Os dados experimentais utilizados no problema direto e inverso	155
Apêndice 5	Outros resultados	161

Lista de Figuras

Figura 1.1 - O problema direto	23
Figura 1.2 - O problema inverso	23
Figura 1.3 - Esquema dos passos desenvolvidos nesse trabalho	24
Figura 2.1 - Evolução do uso dos problemas direto e inverso na modelagem ambiental	28
Figura 3.1 - Divisão dos hidrocarbonetos utilizados nos estudos biogeoquímicos em sedimento marinhos segundo sua origem	30
Figura 3.2 - Estrutura molecular de alguns hidrocarbonetos policíclicos aromáticos	31
Figura 4.1 - A Baía de Guanabara	38
Figura 4.2 - Principais atividades envolvendo petróleo e derivados	39
Figura 4.3 - Divisão hidrológica da Baía de Guanabara	39
Figura 5.1 - Processos considerados no modelo ambiental	41
Figura 5.2 - Representação das correlações de Bintein et al. e Meylan et al. com dados experimentais em organismos: (a) Plâncton (b) invertebrados bentônicos, (c) peixes planctívoros; (d) peixes piscívoros	50
Figura 5.3 - Esquema do problema direto em regime transiente para ser resolvido no SIMULINK	53
Figura 7.1 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = -2$	74
Figura 7.2 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = -1$	75
Figura 7.3 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = 0$	75
Figura 7.4 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = 1$	76
Figura 7.5 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = 2$	76
Figura 7.6 - Valores de B versus q que levam a zero os valores mínimos de D_{Bq}	77
Figura 7.7 - Estimativa da taxa de emissão do antraceno com 7% de	

ruído nos dados experimentais	79
Figura 7.8 - Estimativa do Kt do fenantreno com 7% de ruído nos dados experimentais	80
Figura 7.9 - Estimativa da altura do sedimento com 7% de ruído nos dados experimentais	80
Figura 7.10 - Estimativa do ORGS. com 7% de ruído nos dados experimentais	80
Figura 7.11 - Estimativa do ORGP com 7% de ruído nos dados experimentais	81
Figura 7.12 - Pontos de coleta de sedimento feito por Hamacher (1996)	86
Figura 7.13 - Pontos de coleta de sedimento estabelecidos por Lima (1996)	87
Figura 7.14 - Pontos de coleta de mexilhão considerados por Azevedo (1998)	87
Figura 7.15 - Pontos de coleta de mexilhão considerados por Lima (2001)	88
Figura 7.16 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = -2$	96
Figura 7.17 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = -1$	96
Figura 7.18 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = -0$	97
Figura 7.19 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = 1$	97
Figura 7.20 - Valores mínimos de D_{Bq} versus B para $q = 2$	98
Figura 7.21 - Relação entre LOG BAF e LOG Kow (os pontos 1, 2, 3, 4 e 5 estão relacionados ao antraceno, fenantreno, pireno, fluoranteno e criseno, respectivamente)	100
Figura 7.22 - Relação entre LOG BAF e LOG Kow (os pontos 6, 7, 8, 9 e 10 estão relacionados ao naftaleno, fluoreno, BbF, BkF e BaP respectivamente)	101
Figura 7.23 - Estimativa da taxa de emissão do antraceno com 7% de ruído nos dados experimentais	103
Figura 7.24 - Estimativa do Kt do fenantreno com 7% de ruído nos dados experimentais	104

Figura 7.25 - Estimativa da altura do sedimento com 7% de ruído nos dados experimentais	104
Figura 7.26 - Estimativa do ORGS. com 7% de ruído nos dados experimentais	104
Figura 7.27 - Estimativa do ORGP com 7% de ruído nos dados experimentais	105
Figura 7.28 – Estimativa do parâmetro E com 7% de ruído nos dados experimentais	105
Figura 7.29 – Estimativa do parâmetro G com 7% de ruído nos dados experimentais	105
Figura 7.30 - Concentração do fenantreno na água e no sedimento <i>versus</i> sua emissão, para diferentes valores de Kt	106
Figura 7.31 - Concentração do antraceno na água e no sedimento <i>versus</i> sua emissão	108
Figura 7.32 - Concentração do fenantreno na água e no sedimento <i>versus</i> sua emissão	108
Figura 7.33 - Concentração do pireno na água e sedimento <i>versus</i> sua emissão	109
Figura 7.34 - Concentração do fluoranteno na água e sedimento <i>versus</i> sua emissão	109
Figura 7.35 - Concentração do criseno na água e no sedimento <i>versus</i> sua emissão	110
Figura 7.36 - Concentração do antraceno no sedimento <i>versus</i> tempo	113
Figura 7.37 - Concentração do fenantreno no sedimento <i>versus</i> tempo	113
Figura 7.38 - Concentração do pireno no sedimento <i>versus</i> tempo	113
Figura 7.39 - Concentração do fluoranteno no sedimento <i>versus</i> tempo	114
Figura 7.40 - Concentração do criseno no sedimento <i>versus</i> tempo	114
Figura 7.41 - Concentração do antraceno na água <i>versus</i> tempo	114
Figura 7.42 - Concentração do fenantreno na água <i>versus</i> tempo	115
Figura 7.43. Concentração do pireno na água <i>versus</i> tempo	114
Figura 7.44 - Concentração do fluoranteno na água <i>versus</i> tempo	115

Figura 7.45 - Concentração do criseno na água <i>versus</i> tempo	116
Figura 7.46 – Esquema feito no SIMULINK para o exemplo 2	117
Figura 7.47 - Concentração do antraceno no sedimento <i>versus</i> tempo	119
Figura 7.48 - Concentração do fenantreno no sedimento <i>versus</i> tempo	119
Figura 7.49 - Concentração do pireno no sedimento <i>versus</i> tempo	119
Figura 7.50 - Concentração do fluoranteno no sedimento <i>versus</i> tempo	120
Figura 7.51 - Concentração do criseno no sedimento <i>versus</i> tempo	120
Figura 7.52 - Concentração do antraceno na água <i>versus</i> tempo.	120
Figura 7.53 - Concentração do fenantreno na água <i>versus</i> tempo	121
Figura 7.54 - Concentração do pireno na água <i>versus</i> tempo	121
Figura 7.55 - Concentração do fluoranteno na água <i>versus</i> tempo	121
Figura 7.56 - Concentração do criseno na água <i>versus</i> tempo	122
Figura 7.57 - Concentração do BaP no sedimento <i>versus</i> tempo	124
Figura 7.58 - Concentração do BaP na água <i>versus</i> tempo	124
Figura 7.59 - Concentração do BaP na água <i>versus</i> tempo, nas primeiras 500 horas	125

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 - Principais áreas de aplicação dos modelos de multimeios	28
Tabela 3.1 - Concentrações de HPAs capaz de produzir alterações na biota marinha	33
Tabela 3.2 - Propriedades físico - químicas das substâncias estudadas	34
Tabela 5.1 - Processos considerados no modelo de multimeios	42
Tabela 5.2 - Nomenclatura utilizada.	43
Tabela 6.1 - Incógnitas a ser estimadas no caso 1	57
Tabela 6.2 - Incógnitas a ser estimadas no caso 2	59
Tabela 7.1 - Propriedades físico-químicas e parâmetros do benzeno no Lago Ontário	69
Tabela 7.2 - Características do Lago Ontário	70
Tabela 7.3 - Comparação entre as concentrações do benzeno no Lago Ontário	71
Tabela 7.4 - Parâmetros dos HPAs em um ambiente similar ao Lago Ontário.	72
Tabela 7.5 - Concentração dos HPAs no sedimento e na água	73
Tabela 7.6 - Incógnitas a serem estimadas no caso - teste	73
Tabela 7.7 - Valores ótimos de q para diferentes B	77
Tabela 7.8- Valores estimados com diferentes B e q	78
Tabela 7.9 - Características gerais da Baía de Guanabara.	82
Tabela 7.10 - Dados sobre os contaminantes estudados na Baía de Guanabara	83
Tabela 7.11 - Valores máximos e mínimos onde os valores das incógnitas foram procurados	83
Tabela 7.12 - Concentrações dos HPAs no sedimento obtidas por Hamacher (1996) em ng/g	84
Tabela 7.13 - Concentrações dos HPAs no sedimento obtidas por Lima (1996) em ng/g.	84

Tabela 7.14 - Concentrações dos HPAs no mexilhão obtidas por Lima (2001) em ng/g	85
Tabela 7.15 - Concentrações dos HPAs no mexilhão obtidas por Azevedo (1998) em ng/g	85
Tabela 7.16 - Resumo sobre a qualidade dos resultados obtidos com os dados de Hamacher (1996), Azevedo (1998) e Lima (2001)	94
Tabela 7.17 - Médias das concentrações dos contaminantes no sedimento e no mexilhão perna-perna utilizadas no problema inverso	95
Tabela 7.18 - Dados característicos do programa que resolveu o problema inverso	98
Tabela 7.19 - Parâmetros estimados pelo problema inverso	99
Tabela 7.20 - Estimativa da concentração dos HPAs	101
Tabela 7.21 - Comparação dos BAF obtidos neste trabalho com os obtidos em outros trabalhos	102
Tabela 7.22 - Estimativa da emissão e concentração de outros poluentes no sedimento. (baseados nos dados de Hamacher (1996)).	107
Tabela 7.23. – Concentrações de alguns HPAs no sedimento, água e mexilhão obtido do modelo QWASI ou do problema direto em regime estacionário	110
Tabela 7.24 - Valores iniciais do exemplo 2	112
Tabela 7.25 - Valores calculados para serem utilizados na solução do exemplo 2	112
Tabela 7.26 - Resumo dos resultados do exemplo 2	112
Tabela 7.27 - Valores iniciais do exemplo 3	117
Tabela 7.28 - Valores calculados para serem utilizados na solução do exemplo 3	118
Tabela 7.29 - Resumo dos resultados do exemplo 3.	118
Tabela 7.30 - Valores iniciais do exemplo 4	123
Tabela 7.31 - Valores calculados para serem utilizados na solução do exemplo 4	123

Lista de Quadros

Quadro 7.1 - Medida da C_{SS} na estação 5 feita por Hamacher (1996)	88
Quadro 7.2 - Medida da C_{SS} na estação H feita por Lima (1996)	89
Quadro 7.3 - Medida da C_{mex} na estação 4 feita por Azevedo (1998)	89
Quadro 7.4 - Medida da C_{mex} na estação 4 feita por Lima (2001)	89
Quadro 7.5 - Médias das C_{SS} entre as estações 5, 6 e 7 obtidas por Hamacher (1996)	90
Quadro 7.6 - Médias das C_{SS} entre as estações E, G e H obtidas por Lima (1996)	90
Quadro 7.7 - Média das C_{mex} entre as estações 1, 2, 3, 4 e 5 obtidas por Azevedo (1998).	91
Quadro 7.8 - Médias das C_{mex} entre as estações 3, 4, 5,6,7 e 8 obtidas por Lima (2001)	91
Quadro 7.9 - Médias das C_{SS} entre todas as estações feitas por Hamacher (1996)	92
Quadro 7.10 - Médias das C_{SS} entre todas as estações feitas por Lima (1996)	92
Quadro 7.11 - Médias das C_{mex} entre todas as estações feitas por Azevedo (1998)	92
Quadro 7.12 - Médias das C_{mex} entre todas as estações feitas por Lima (1998)	93

Lista de Abreviaturas e Símbolos

A_s	área horizontal da interface sedimento – água.
A_w	área superficial da água
B	parâmetro momentum
BAF	fator de bioacumulação
BCF	fator de bioconcentração
c1, c2	elementos que formam a matriz C
C	matriz da concentração na eq.(5.27) do problema transiente
C_b	concentração da substancia na biota
C_A	concentração da substância no ar.
C_{mex}	concentração da substância no mexilhão.
C_{SS}	concentração da substância nos sólidos do sedimento.
C_{ST}	concentração da substância no sedimento.
C_{VFO}	concentração da substância nas partículas de aerossóis.
C_{VPW}	concentração da substância nas partículas na água.
C_{VPX}	concentração da substância nas partículas que entram com a água.
C_w	concentração da substância dissolvida na água.
C_{WI}	concentração da substância dissolvida na água que ingressa.
C_{WT}	concentração total da substância na água.
d11, d12, d21, d22	elementos da matriz D
D	matriz dos coeficientes na eq. (5.27) do problema transiente
D_{Bq}	distância de Bregman
D_{ENP}	densidade das partículas na água.
D_{ENQ}	densidade das partículas no ar (aerossóis).
D_{ENS}	densidade das partículas do sedimento.
E	coeficiente que relaciona LOG BAF com LOG kow

F_k	função erro
G	coeficiente que relaciona LOG BAF com LOG k_{ow}
E_w	emissão da substância na água.
G_{BN}	taxa de soterramento.
G_{DN}	taxa de deposição de sólidos.
G_{RN}	taxa de ressuspensão de sólidos.
G_I	vazão da água de entrada.
G_J	vazão da água de saída.
H	constante da lei de Henry
H_s	altura do sedimento ativo
I	matriz unitária
J	matriz Jacobiana
k_1	fator para obter a concentração da substância na água em ng/l
k_2	fator para obter a concentração da substância no sedimento em ng/g
K_{AW}	coeficiente de partição ar-água.
K_{OC}	coeficiente de partição carbono orgânico - água.
K_{OW}	coeficiente de partição octanol-água
K_{SW}	coeficiente de partição sedimento-água
K_{WT}	fator de conversão de C_w a C_{WT}
K_{ST}	fator de conversão de C_{SS} a C_{ST}
K_T	coeficiente de transferência de massa por difusão sedimento – água
K_V	coeficiente de transferência de massa no ar
K_{VW}	coeficiente de transferência de massa na água
k_{ow}	coeficiente de partição octanol-água
L_{Bq}	lagrangeana
LOG	logaritmo
ng	nanograma
P	matriz de controle na eq. (5.27) do problema transiente
O_{RGI}	fração de carbono orgânico nas partículas na água entrando
O_{RGP}	fração de carbono orgânico nas partículas suspensas na água

O_{RGR}	fração de carbono orgânico nos sólidos de sedimento ressuspenso
O_{RGS}	fração de carbono orgânico nos sólidos do sedimento
Q	coeficiente de limpeza do ar
q	parâmetro do grau da q-discrepancia
q_{med}^k	dado medido
q_{cal}^k	dado medido
R	constante dos gases
Re	Funcional dos resíduos quadrados
R_{AIN}	taxa de chuva (índice pluviométrico)
t	tempo
T	tempo total
T_{DS}	tempo de meia vida da substância no sedimento
T_{DW}	tempo de meia vida da substância na água
T_K	temperatura ambiente
T_{MK}	temperatura de fusão da substância
V_{DEPA}	velocidade de deposição seca de aerossóis
V_{FS}	fração volumétrica de partículas no sedimento superficial
V_S	volume do sedimento ativo
V_W	volume da água
Z	capacidade de fugacidade
\vec{Z}	vetor incógnita
λ_k	multiplicadores de Lagrange
η_{Bq}	funcional momento de q-discrepância
μg	micrograma