

## 5

### O problema direto

As equações de balanço de massa do contaminante a serem resolvidas no problema direto, foram desenvolvidos por Mackay (1983, 1989a, 1989b, 1989c), em seu modelo QWASI para um sistema (ambiente) em regime estacionário. O modelo idealiza o ambiente a ser estudado como uma coluna de água perfeitamente misturada sobre uma camada superficial de sedimento perfeitamente misturada e uma camada de sedimento profundo.

O modelo QWASI faz seguintes considerações:

- O ambiente é formado pelos compartimentos: ar, água e sedimento;
- A coluna d'água é completamente misturada;
- Existe uma camada de sedimento ativo completamente misturado;
- O contaminante decai de acordo com uma cinética de primeira ordem;
- O sistema é isotérmico e a temperatura da água é 25 °C;
- Um único contaminante é investigado;
- O movimento do contaminante é independente da presença de outras substâncias;
- O fluxo de água através do corpo d'água é constante.

O modelo QWASI usa o conceito de fugacidade, este modelo não se aplica para substâncias não voláteis, como metais ou substâncias iônicas, uma vez que as fugacidades da substância nos meios são iguais às suas pressões parciais. Nos metais e nas substâncias iônicas estas pressões são desprezadas. O modelo é descrito de forma mais detalhada no Apêndice 1.

Dezessete processos são considerados neste modelo ambiental utilizado. Esses processos são ilustrados na Figura 5.1 e listados na Tabela 5.1.

Tendo como base os processos apresentados na Tabela 5.1, o balanço do contaminante na água e no sedimento, podem ser escritos de acordo com as equações (5.1) e (5.2).

$$V_w \frac{\partial C_{WT}}{\partial t} = [1]+[2]+[3]+[4]+[5]+[6]+[7]+[8]+[9]-[10]-[11]-[12]-[13]-[14]-[15] \tag{5.1}$$

$$V_s \frac{\partial C_{ST}}{\partial t} = [12]+[15]-[5]-[6]-[16]-[17] \tag{5.2}$$

sendo  $V_w$  volume da água

$V_s$  volume de sedimento superficial

$C_{WT}$  concentração do contaminante no compartimento da água

$C_{ST}$  concentração do contaminante no compartimento do sedimento

$t$  tempo

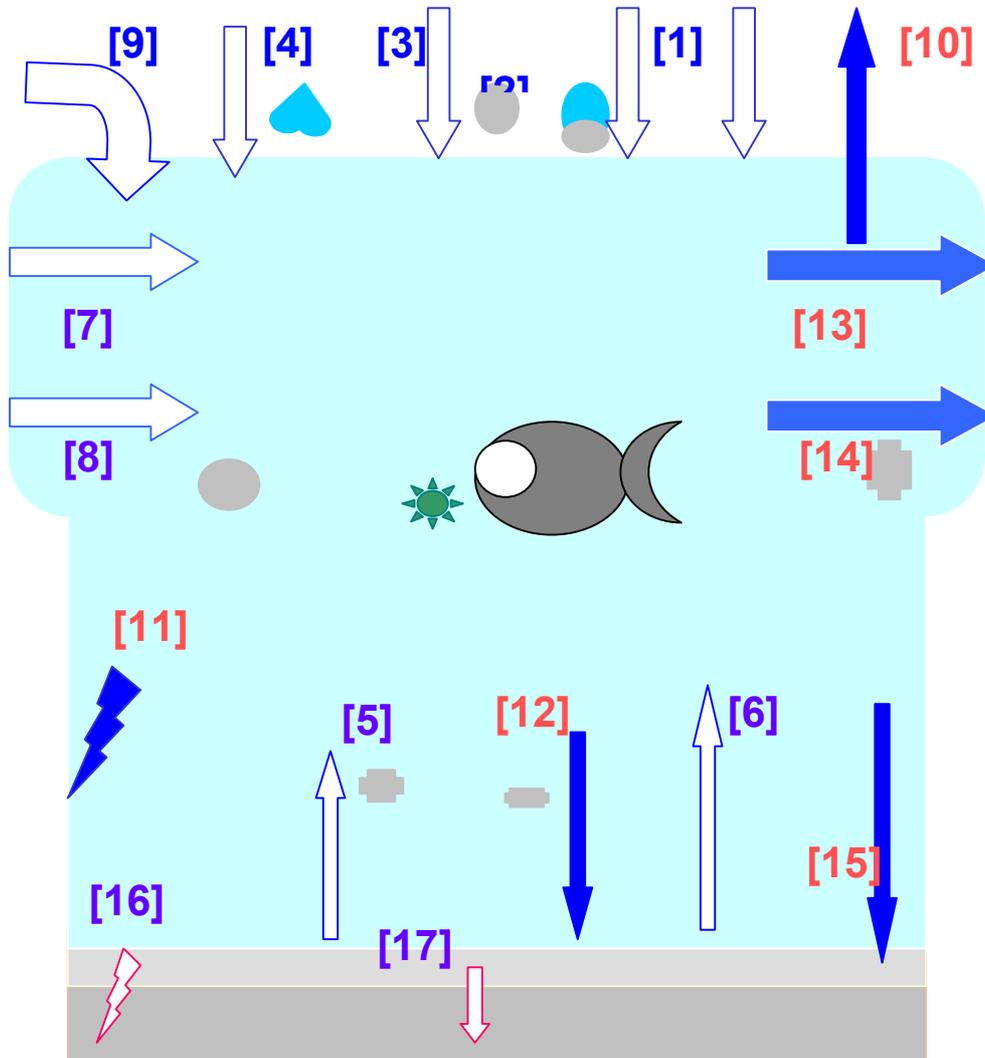


Figura 5.1 - Processos considerados no modelo ambiental (listados na Tabela 5.1).

Tabela 5.1 - Processos considerados no modelo de multimeios

ar- água		água	
[1]	Absorção	[7]	vazão de entrada de água
[2]	deposição úmida de partículas	[8]	partículas que entram com a água
[3]	deposição seca de partículas	[11]	transformação da substância na água
[4]	chuva	[13]	vazão da saída de água
[9]	emissão da substância na água	[14]	partículas que sai com a água
[10]	Volatilização		
água-sedimento		sedimento	
[5]	ressuspensão do sedimento	[16]	transformação no sedimento
[6]	difusão sedimento - água	[17]	soterramento
[12]	deposição no sedimento		
[15]	difusão água – sedimento		

### 5.1.

#### Formulação e solução matemática do problema direto no regime estacionário.

No regime estacionário, as eqs. (5.1) e (5.2) ficam:

$$0 = [1]+[2]+[3]+[4]+[5]+[6]+[7]+[8]+[9]-[10]-[11]-[12]-[13]-[14]-[15] \quad (5.3)$$

$$0 = [12]+[15]-[5]-[6]-[16]-[17] \quad (5.4)$$

Para poder calcular as concentrações do contaminante na água e no sedimento é necessário escrever as equações das taxas de cada processo. Estas equações envolvem parâmetros do ambiente e do contaminante em estudo. Os valores desses parâmetros podem ser medidos experimentalmente. As equações de taxa dos processos são dadas a seguir:

$$[1] \text{ absorção} \quad C_A A_W K_V / K_{AW}$$

$$[2] \text{ deposição úmida ar-água} \quad 6 \times 10^6 C_A R_{AIN} A_W F_{RAT} D_{ENQ} Q / (V_P C_{VFQ})$$

[3] deposição seca ar-água	$6 \times 10^6 C_A V_{DEPA} A_W D_{ENQ} F_{RAT} / (V_P C_{VFQ})$
[4] chuva	$C_A R_{AIN} A_W / K_{AW}$
[5] ressuspensão sedimento - água	$C_{SS} O_{RGR} G_{RN} A_W / (O_{RGS} D_{ENS})$
[6] difusão sedimento - água	$C_{SS} K_T A_S / K_{SW}$
[7] vazão da entrada de água	$C_{WI} G_I K_{WPI}$
[8] partículas que entram com a água	$C_{WI} G_I K_{WPI} C_{VPX} / D_{ENP}$
[9] emissão	$E_W$
[10] volatilização	$C_W K_V A_W$
[11] transformação química na água	$0.693 \cdot C_W K_{WT} V_W / T_{DW}$
[12] deposição no água-sedimento	$C_W G_{DN} A_W K_{OC} O_{RGP}$
[13] vazão da saída de água	$C_W G_J$
[14] partículas que sai com a água	$C_W G_J C_{VPW} K_{OC} O_{RGP}$
[15] difusão água – sedimento	$C_W K_T A_S$
[16] transformação química no sedimento	$0.693 \cdot C_{SS} K_{ST} H_S A_S / T_{DS}$
[17] soterramento	$C_{SS} G_{BN} A_W / D_{ENS}$

A nomenclatura utilizada é dada na Tabela 5.2

Tabela 5.2 - Nomenclatura utilizada.

$A_S$	área horizontal da interface sedimento – água.
$A_W$	área superficial da água
$C_A$	concentração da substância no ar.
$C_M$	concentração da substância no mexilhão.
$C_{SS}$	concentração da substância nos sólidos do sedimento.
$C_{ST}$	concentração da substância no sedimento.
$C_{VFQ}$	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.
$D_{ENP}$	densidade das partículas na água.
$D_{ENQ}$	densidade das partículas no ar (aerossóis).
$D_{ENS}$	densidade das partículas do sedimento.
$E_W$	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
$K_{AW}$	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
$K_T$	coeficiente de transferência de massa sedimento – água.
$K_V$	coeficiente de transferência de massa por volatilização no ar.
$K_{VW}$	coeficiente de transferência de massa na água.
$O_{RGI}$	fração de carbono orgânico nas partículas que entram com a água.
$O_{RGP}$	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.
$R$	constante dos gases.
$R_{AIN}$	taxa de chuva (índice pluviométrico).
$T_{DS}$	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 (superficial.)
$V_W$	volume da água.
Outras correlações usadas:	
$K_{AW} = H / RT_K$	
$K_{SW} = K_{OC} O_{RGS} D_{ENS}$	
Se $T_{MK} > T_K$ , $F_{RAT} = \exp(6.79 \cdot (1 - T_{MK} / T_K))$	
Caso contrário $F_{RAT} = 1$	
$K_{WT} = 1 - (C_{PW} + K_{OC} O_{RGP} D_{ENP} C_{PW}) / D_{ENP}$	
$K_{ST} = V_{FS} + \frac{1 - V_{FS}}{K_{SW}}$	
$K_{OC} = 4.1 \cdot 10^{-7} K_{OW}$	
$K_V = K_{VW} K_{VA} K_{AW} / (K_{VA} K_{AW} + K_{VW})$	
$K_{WPI} = (1 + K_{OC} O_{RGP} C_{VPX}) / (1 + K_{OC} O_{RGI} C_{VPX})$	
$C_{ST} = C_{SS} K_{ST}$	
$C_{WT} = C_W K_{WT}$	

Escrevendo as eqs. (5.3) e (5.4) em termos dos parâmetros acima definidos, chegou-se a duas equações com duas incógnitas: a concentração da substância dissolvida na água,  $C_W$ , e a concentração da substância nos sólidos do sedimento,  $C_{SS}$ . Por tanto obter  $C_W$  e  $C_{SS}$  será a solução do problema direto, que é apresentada a seguir:

$$C_{SS(n)} = \frac{\{[1]+[2]+[3]+[4]+E_{(n)} + (1 + \frac{C_{VPX}}{D_{ENP}})(C_{WI(n)} G_I \frac{1 + K_{OC} C_{VPX} O_{RGP}}{1 + K_{OC} C_{VPX} O_{RGI}})\}}{\{(\frac{O_{RGR} \cdot G_{RN} A_W}{O_{RGS} \cdot D_{ENS}} + \frac{A_S K_{T(n)}}{K_{OC} D_{ENS} O_{RGS}} + 0.693 \cdot H_S A_S \frac{V_{FS} + \frac{(1 - V_{FS})}{K_{OC} D_{ENS} O_{RGS}}}{T_{DS}(n)} + \frac{G_{BN} A_W}{D_{ENS}})\}}$$

$$\frac{\cdot \{G_{DN} A_W K_{OC} O_{RGP} + K_{T(n)} \cdot A_S\}}{\cdot (K_{V(n)} A_W + 0.693(1 - V_{FP} + V_{FP} K_{OC} O_{RGP} \frac{D_{ENP} V_W}{T_{DW}(n)}) + (G_{DN} A_W + G_J C_{VPW}) K_{OC} O_{RGP}} \cdot 1 \quad (5.5)$$

$$+ G_J + O_{RGR} A_S) \} - \left\{ \left( \frac{O_{RGR} G_{RN} A_W}{O_{RGS} D_{ENS}} + \frac{A_S K_{T(n)}}{K_{OC} D_{ENS} O_{RGS}} \right) (G_{DN} A_W K_{OC} O_{RGP} + K_{T(n)} A_S) \right\}$$

$$C_{W(n)} = C_{SS(n)} \left( \frac{\frac{O_{RGR} \cdot G_{RN} A_W}{O_{RGP} \cdot D_{ENS}} + K_T \frac{A_S}{K_{SW}} + 0.693 \cdot H_S A_S \frac{V_{FS} + \frac{(1-V_{FS})}{K_{OC} D_{ENS} O_{RGS}}}{T_{DS}(n)} + \frac{G_{BN} A_W}{D_{ENS}}}{G_{DN} A_W K_{OC} O_{RGP} + K_{T(n)} A_S} \right) \quad (5.6)$$

Usando as relações  $C_{WT} = K_{WT} C_W$  e  $C_{ST} = K_{ST} C_{SS}$  as concentrações totais da substância na água,  $C_{WT}$ , e no sedimento,  $C_{ST}$ , podem ser obtidas.

Outra forma de escrever a eqs (5.3) e (5.4) é a partir da definição dos coeficientes A1, A2, A3, A4 e A5, que não dependam de  $C_{SS}$  e  $C_W$ :

$$A1 = [1] + [2] + [3] + [4] + [7] + [8] + [9] \quad (5.7)$$

$$A2 = ([5] + [6]) / C_{SS} = \{O_{RGR} G_{RN} A_W / (O_{RGS} D_{ENS})\} + \{K_T A_S / K_{SW}\} \quad (5.8)$$

$$A3 = (-[10] - [11] - [12] - [13] - [14] - [15]) / C_W = -\{K_V A_W\} - \{0.693 \cdot K_{WT} V_W / T_{DW}\} - \{G_{DN} A_W K_{OC} O_{RGP}\} - \{G_J\} - \{G_J C_{VPW} K_{OC} O_{RGP}\} - \{K_T A_S\} \quad (5.9)$$

$$A4 = ([12] + [15]) / C_W = \{G_{DN} A_W K_{OC} O_{RGP}\} + \{K_T A_S\} \quad (5.10)$$

$$A5 = (-[5] - [6] - [16] - [17]) / C_{SS} = -\{O_{RGR} G_{RN} A_W / (O_{RGS} D_{ENS})\} - \{K_T A_S / K_{SW}\} - \{G_{BN} A_W / D_{ENS}\} \quad (5.11)$$

Assim, as equações (5.3) e (5.4) podem ser escritas como:

$$A1 + A2 \cdot C_{SS} + A3 \cdot C_W = 0 \quad (5.12)$$

e

$$A4 \cdot C_W + A5 \cdot C_{SS} = 0 \quad (5.13)$$

Logo, obtém-se de (5.13):

$$C_W = C_{SS} \cdot A5/A4 \quad (5.14)$$

substituindo em (5.12):

$$C_{SS} = A1 \cdot A4 / (A5 \cdot A3 - A2 \cdot A4) \quad (5.15)$$

$$C_W = A1 \cdot A3 / (A5 \cdot A3 - A2 \cdot A4) \quad (5.16)$$

## 5.2.

### **A bioconcentração e a bioacumulação em organismos marinhos para a predição da concentração de contaminantes na água**

Para poder prever a concentração de uma substância na água a partir de concentrações medidas em organismos aquáticos, é importante conhecer os impactos das descargas de substâncias e efeitos tóxicos nesses organismos. Tem sido amplamente observado que organismos (plâncton, animais invertebrados e vertebrados) podem ter altas concentrações de certos contaminantes orgânicos em relação às concentrações destas substâncias no ambiente em que eles habitam (ar, água, solo e sedimento). Este fenômeno é regularmente chamado de bioconcentração ou bioacumulação (Lyman et al., 1990; Mackay, 1991; Mackay & Fraser, 2000). Organismos que bioconcentram ou bioacumulam substâncias podem ser explorados com monitores de contaminação ambiental. Uma preocupação particular são as substâncias que são retidas pelos organismos, passando de um organismo a outro na cadeia alimentar. O resultado é, possivelmente, concentrações progressivamente mais altas da substância química em níveis mais altos da cadeia alimentar.

A bioconcentração também é o processo que causa o aumento da concentração química de uma substância em um organismo aquático, comparado com a concentração na água, devido à absorção da substância por via respiratória ou superficial. Além disso, substâncias se incorporam na biota ao longo da cadeia alimentar por captação dietética, também chamada de biomagnificação. A soma da bioconcentração e biomagnificação é a bioacumulação.

A bioconcentração é investigada sob as condições de laboratório. A bioacumulação por sua vez, não pode assim determinada por envolver o efeito de biomagnificação.

O fator de bioconcentração (BCF) e o fator de bioacumulação (BAF) são definidos como:

$$\text{BCF ou BAF} = \frac{C_b}{C_{WT}} \quad (5.17)$$

onde  $C_b$  é a concentração da substância no biota (dada em  $\mu\text{g/g}$ ) e  $C_{WT}$  é a concentração do contaminante na água dada em  $\text{mg/l}$  de água, BCF é dado em  $\text{l/kg}$ .

Neste trabalho a biota utilizada foi o mexilhão perna-perna. A seguinte expressão foi empregada.

$$C_{WT}(\text{mg/l}) = \frac{C_{mex}(\mu\text{g/g})}{BAF} \quad (5.18)$$

onde  $C_{mex}$  é a concentração do contaminante no mexilhão dada  $\mu\text{g/g}$  em peso seco do mexilhão.

Duas importantes e recentes correlações entre o logaritmo do fator de bioconcentração normalizado (LOG BCF) ou o logaritmo do fator de bioacumulação normalizado (LOG BAF) com várias propriedades físico-químicas, tais como o coeficiente de partição octanol/água ( $K_{ow}$ ), a solubilidade na água, o coeficiente de absorção, entre outras foram desenvolvidas por Bintein et al. (1993), e Meylan et al. (1999), ajustando dados experimentais.

A correlação de Bintein et al. (1993) é dada pela seguinte expressão;

$$\text{LOG BCF} = 0,91 \text{ LOG Kow} - 1,975 \text{ LOG} (6,8 \cdot 10^{-7} \text{ Kow} + 1) - 0,768 \quad (5.19)$$

e a correlação de Meylan et al. (1999) é dada por:

$$\text{LOG Kow} < 1, \quad \text{LOG BCF} = 0,5$$

$$\text{LOG Kow } 1-7, \quad \text{LOG. BCF} = -0,77 \cdot \text{LOG Kow} - 0,7 + \sum F_i$$

$$\text{LOG Kow } 7 - 10,5, \quad \text{LOG. BCF} = -1,37 \cdot \text{LOG Kow} + 14,4 + \sum F_i$$

$$\text{LOG Kow} > 10,5; \quad \text{LOG. BCF} = 0,5 \quad (5.20)$$

onde  $F_i$  representa uma serie de 12 fatores associados com as características estruturais do organismo.

A Figura 5.2 apresenta a avaliação das correlações de Bintein et al. (1993) e Meylan et al. (1999) com dados experimentais, em organismos de diferentes níveis na cadeia alimentar. Notar que as correlações de Meylan et al. (1999) fornecem uma melhor predição entre o LOG BAF e LOG Kow.

Uma vez que as medidas da concentração no mexilhão foram obtidas a partir de amostras em seu habitat natural e não em laboratório, deve-se considerar o fator de bioacumulação (BAF) ao invés do fator de bioconcentração (BCF).

Neste trabalho serão estudadas apenas HPAs com LOG Kow menores a 6,5. Onde a relação entre LOG BAF e LOG Kow tem dependência linear e pode ser expressa como:

$$\text{LOG. BAF} = E \cdot \text{LOG Kow} + G \quad (5.21)$$

das equações (5.18) e (5.21) tem-se:

$$C_{\text{mex}} = C_{\text{WT}} \cdot A \text{LOG} (E \cdot \text{LOG Kow} + G) \quad (5.22)$$

Observa-se ainda que a partir da concentração de uma substancia no mexilhão a concentração na água pode ser prevista.

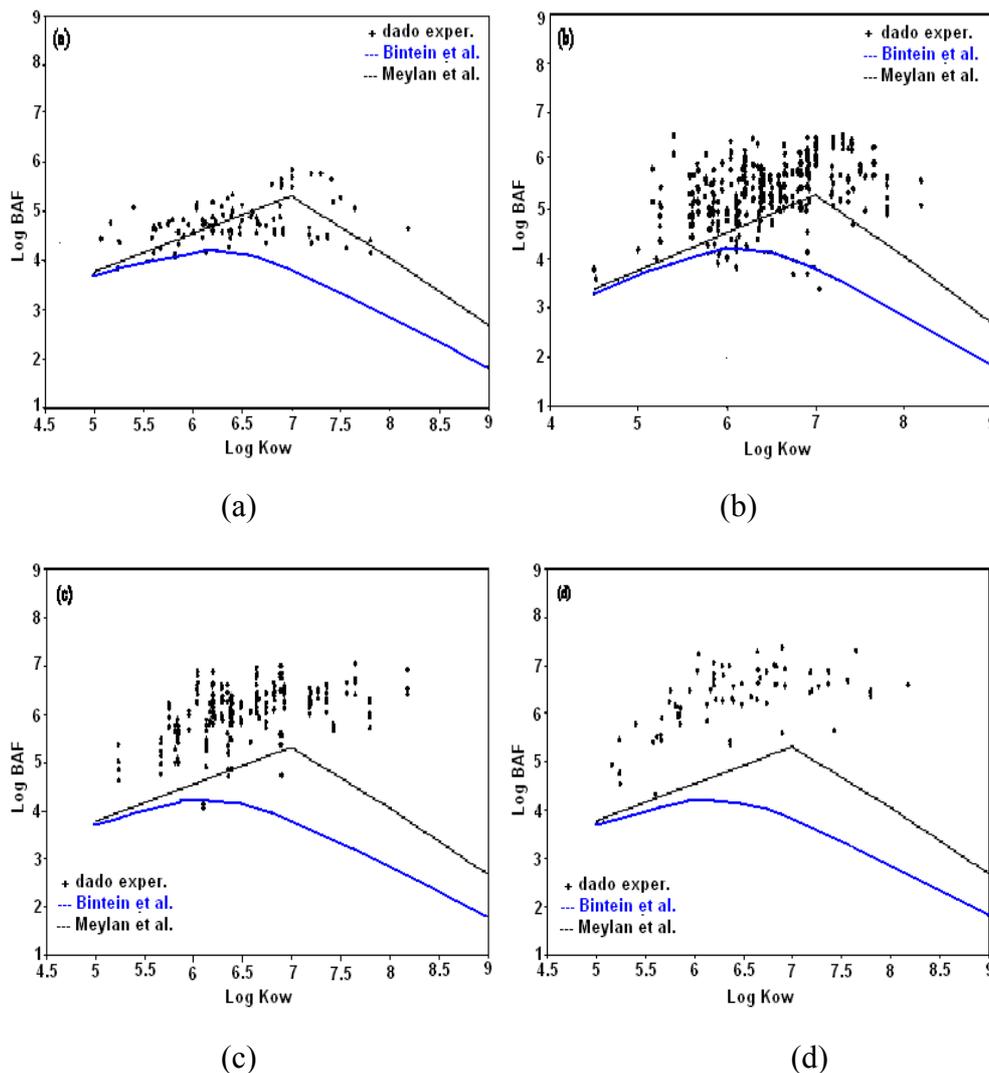


Figura 5.2 - Representação das correlações de Bintein et al. e Meylan et al. com dados experimentais em organismos: (a) Plancton (b) invertebrados bentônicos, (c) peixes planctívoros; (d) peixes piscívoros (Epaminondas et al., 2002).

No Apêndice 2 é feita uma exposição sobre a biologia do mexilhão perna-perna.

### 5.3.

#### Formulação matemática do problema direto no regime transiente

A formulação do problema direto é dada pelas eqs. (5.1) e (5.2), considerando que as concentrações na água e no sedimento agora dependem do tempo. As eqs. (5.1) e (5.2) podem ser escritas da seguinte forma:

$$V_w K_{WT} \frac{\partial C_w}{\partial t} = \dot{C}_w = A1 + A2 \cdot C_{SS}(t) + A3 \cdot C_w(t) \quad (5.23)$$

$$V_s K_{ST} \frac{\partial C_{SS}}{\partial t} = \dot{C}_{SS} = A4 \cdot C_w(t) + A5 \cdot C_{SS}(t) \quad (5.24)$$

com as condições iniciais:  $t=0$ ,  $C_w(0) = C_{wo}$  e  $C_{SS}(0) = C_{SSo}$

As eqs. (5.23) e (5.24) podem ser resolvidas pelo método de Runge-Kutta, descrito a seguir.

### O método de Runge-Kutta

O método de Runge-Kutta de 4ª ordem tem uma precisão até o termo de quarta ordem da série de Taylor, sendo o erro local proporcional a  $h^5$ . Duas versões do método de Runge-Kutta de 4ª ordem são as mais populares. A primeira baseada na regra de 1/3 de Simpson e a segunda versão na regra de 3/8 de Simpson. Somente a primeira versão é descrita:

A título de comodidade, faz-se uma troca de variáveis:

$$c1 = C_w(t), \quad c2 = C_{SS}(t), \quad p1 = \frac{A1}{K_{WT}V_w}, \quad p2 = 0$$

$$d11 = \frac{A3}{K_{WT}V_w}, \quad d12 = \frac{A2}{K_{WT}V_w}, \quad d21 = \frac{A4}{K_{ST}V_s}, \quad d22 = \frac{A5}{K_{ST}V_s}$$

As eqs. (5.23) e (5.24) são re-escritas da seguinte forma:

$$\dot{c}1 = d11 \cdot c1 + d12 \cdot c2 + p1 \quad (5.25)$$

$$\dot{c}2 = d21 \cdot c1 + d22 \cdot c2 + p2 \quad (5.26)$$

com os valores iniciais:  $t=0$ ,  $c1o = Cwo$  e  $c2o = CSSo$

Assim, as seguintes matrizes são definidas:

$$D = \begin{bmatrix} d11 & d12 \\ d21 & d22 \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} c1 \\ c2 \end{bmatrix} \quad \dot{C} = \begin{bmatrix} \dot{c}1 \\ \dot{c}2 \end{bmatrix} \quad P = \begin{bmatrix} p1 \\ p2 \end{bmatrix} \quad \text{com o valor inicial } Co = \begin{bmatrix} c1o \\ c2o \end{bmatrix}$$

Tem-se que o sistema formado pelas eqs. (5.25) e (5.26) também pode ser representado da seguinte forma:

$$\dot{C} = D \cdot C + I \cdot P \quad (5.27)$$

Para resolver este sistema pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem define-se o tempo total  $T$  onde a equação diferencial será avaliada. Logo  $T$  será discretizada em  $M$  intervalos, cada intervalo de tempo será enumerado com os sub-índice  $m = 0, \dots, M$ . Sendo  $h$  a magnitude do intervalo tempo, as outras correlações usada para calcular a concentração  $c_1$  e  $c_2$  em cada intervalo de tempo são definidos.

$$\begin{aligned} R_1 &= h[D \cdot C + P] \\ R_2 &= h[D \cdot (C + R_1/2) + P] \\ R_3 &= h[D \cdot (C + R_2/2) + P] \\ R_4 &= h[D \cdot (C + R_3) + P] \end{aligned} \quad (5.28)$$

Após o cálculo destes parâmetros a concentração no intervalo de tempo  $m$ , pode ser estimada usando:

$$C_{m+1} = C_m \cdot \frac{1}{6} [(R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4)] \quad \text{onde } m = 0, \dots, M \quad (5.29)$$

Conhecendo-se os valores iniciais para  $m = 0$ ,  $C_o = C_0$  pode-se calcular os valores de  $C_1$ . A partir de  $C_1$  calcula-se o valor de  $C_2$  e assim, pode-se calcular até  $C_M$ .

Neste trabalho se optou por utilizar o SIMULINK, que é uma ferramenta do MATLAB, para resolver as equações (5.23) e (5.24). Para isso foi preciso descrever graficamente estas equações na folha de trabalho do SIMULINK, como é mostrado na Figura 5.3.

Para dar uma explicação do esquema representado na figura 5.3 cada símbolo é descrito abaixo:

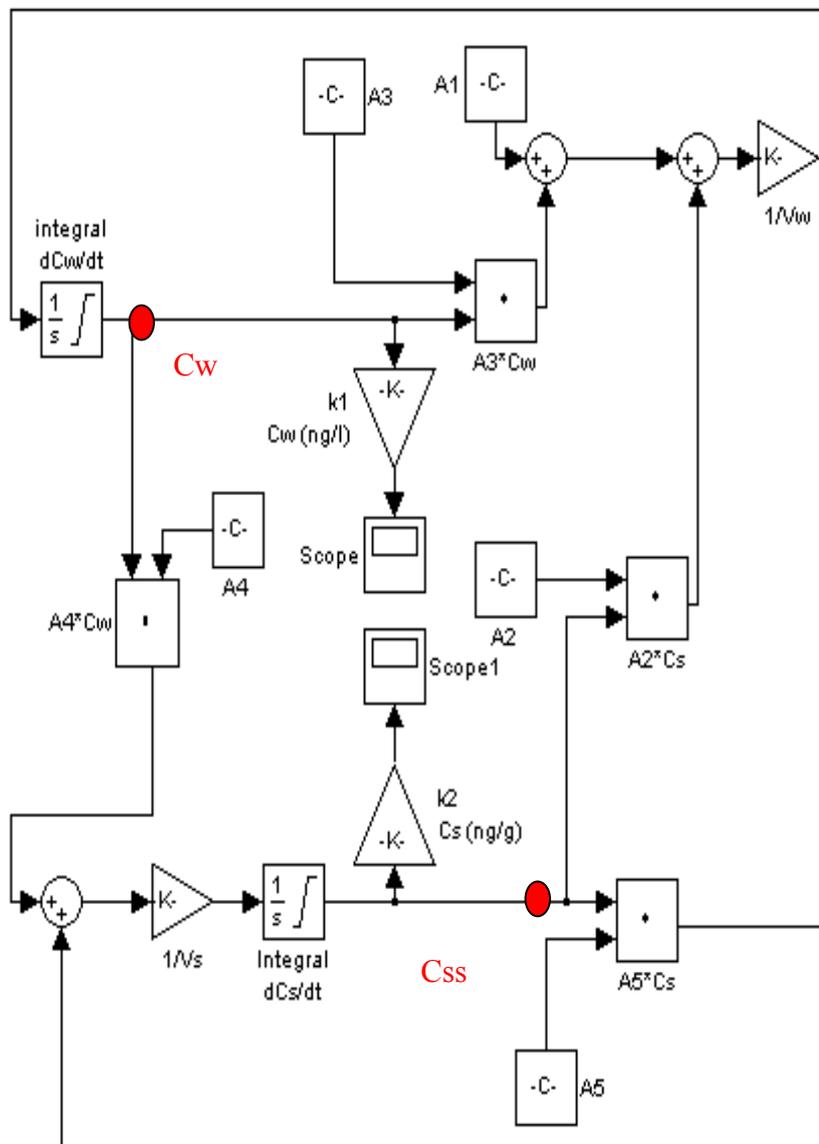
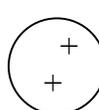
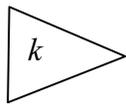
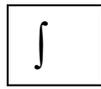


Figura 5.3 - Esquema do problema direto em regime transiente para ser resolvido no SIMULINK.

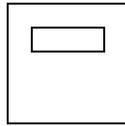
-  uma constante tal como: A1, A2, A3, A4 e A5
-  o produto entre duas variáveis ou números que ingressam ao bloco
-  a soma entre duas variáveis ou números que ingressam ao bloco



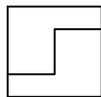
o produto do dado de entrada com um número  $k$



a integral do dado, função ou variável que ingressa no bloco



saída gráfica do resultado, neste caso as concentrações do contaminante no sedimento e na água



a função escada, definindo a variável espacial ou temporal ( $t$ ) no intervalo  $[0 - T]$ . Pode-se construir uma função  $f(t)$  sobre este intervalo e definir outra função  $g(t)$  depois do tempo  $T$

A explicação do funcionamento do esquema pode ser feita tomando 2 pontos de referência dadas em vermelho denominados  $C_w$  e  $C_{ss}$ . A partir do ponto denominado  $C_w$  em vermelho, forma-se o ramo que vai a multiplicar com  $A_3$ , a saída do produto,  $A_3 \cdot C_w$ , vai a somar com  $A_1$  resultando,  $A_3 \cdot C_w + 1$ , este resultado vai a somar-se com a saída do produto de  $A_2$  com o ramo  $C_{ss}$ ,  $A_2 \cdot C_{ss}$ . Finalmente a saída desta soma vai ser multiplicada por  $1/V_w$ . Notar que foi feito o seguinte:

$$(A_1 + A_2 \cdot C_{ss} + A_3 \cdot C_w) / V_w$$

Da acordo com a eq. (5.23), esta expressão é igual a  $\frac{\partial C_w}{\partial t}$  e é o que entra no bloco integrador obtendo como resultado  $C_w$ . Para obter os gráficos em  $C_w$  em função do tempo em magnitudes de ng/l vai ser preciso multiplicar  $C_w$  por um fator  $k_1$ . Para o obter a eq. (5.24) um procedimento similar é feito a partir do ponto vermelho  $C_{ss}$ . Devido a que os dados experimentais da concentração do sedimento são dados em ng/g (em peso seco do sedimento), vai ser preciso multiplicar a saída de  $C_{ss}$  por um fator  $k_2$ , só para obter-lo em ng/g.

No menu de ferramenta do SIMULINK, apresentam-se métodos diferentes para resolver equações diferenciais. O método Runge-Kutta de ordem 4 foi o escolhido neste trabalho.

Mais informações sobre o uso do SIMULINK são obtidas em <http://www.mathworks.com>.