



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO Universidade Federal de Ouro Preto Escola de Minas – Departamento de Engenharia Civil Curso de Graduação em Engenharia Civil



JAINE NAYARA DE ARAÚJO DE OLIVEIRA

APLICAÇÃO DO MODELO W-C PARA PREDIÇÃO DE REDUÇÃO DE TURBIDEZ EM *WETLANDS* CONSTRUÍDOS

Ouro Preto

JAINE NAYARA DE ARAÚJO DE OLIVEIRA

APLICAÇÃO DO MODELO *W*-C PARA PREDIÇÃO DE REDUÇÃO DE TURBIDEZ EM *WETLANDS* CONSTRUÍDOS

Trabalho Final de Curso apresentado como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Engenheiro Civil na Universidade Federal de Ouro Preto.

Orientador: Prof. Dr. Aníbal da Fonseca Santiago

Ouro Preto

2025

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

O48a	Oliveira, Jaine Nayara de Araujo de. Aplicação do modelo w-C para predição de redução de turbidez em wetlands construídos. [manuscrito] / Jaine Nayara de Araujo de Oliveira 2025. 36 f.: il.: color., gráf., tab
	Orientador: Prof. Dr. Aníbal da Fonseca Santiago. Coorientadores: Profa. Ma. Isabela da Silva Pedro Rochinha, Dra. Paula Cristine Silva Gomes. Monografia (Bacharelado). Universidade Federal de Ouro Preto. Escola de Minas. Graduação em Engenharia Civil .
	 Sustentabilidade. 2. Sustentabilidade e meio ambiente - Wetlands. Modelos matemáticos. I. Santiago, Aníbal da Fonseca. II. Gomes, Paula Cristine Silva. III. Rochinha, Isabela da Silva Pedro. IV. Universidade Federal de Ouro Preto. V. Título.
	CDU 624

Bibliotecário(a) Responsável: Maristela Sanches Lima Mesquita - CRB-1716



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO REITORIA ESCOLA DE MINAS DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL



FOLHA DE APROVAÇÃO

Jaine Nayara De Araújo De Oliveira

Aplicação do Modelo W-C Para Predição de Redução de Turbidez em Wetlands Construídos

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Civil da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Engenheira Civil.

Aprovada em 07 de abril de 2025.

Membros da banca

Prof. Dr. Aníbal da Fonseca Santiago - Orientador - Universidade Federal de Ouro Preto Dra. Paula Cristine Silva Gomes - Coorientadora - Universidade Federal de Ouro Preto Mestra Isabela da Silva Pedro Rochinha - Coorientadora - Universidade Federal de Ouro Preto

Profa. Dra. Ana Letícia Pilz de Castro - Universidade Federal de Ouro Preto Dr. Marllus Henrique Ribeiro de Paiva - Defesa Civil - Contagem MG

Prof. Dr. Aníbal da Fonseca Santiago - Orientador, orientador do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de Conclusão de Curso da UFOP em 09/06/2025.



Documento assinado eletronicamente por **Anibal da Fonseca Santiago**, **PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 09/06/2025, às 11:47, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <u>http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?</u> <u>acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0</u>, informando o código verificador **0926210** e o código CRC **344B0D11**.

Referência: Caso responda este documento, indicar expressamente o Processo nº 23109.007241/2025-33

R. Diogo de Vasconcelos, 122, - Bairro Pilar Ouro Preto/MG, CEP 35402-163 Telefone: 3135591546 - www.ufop.br

Dedico este trabalho à minha eu do passado, pois apesar de todas as dificuldades, chegou até aqui. E à minha eu do futuro, para que ela nunca se esqueça que absolutamente tudo nessa vida é passageiro.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a todas as pessoas que fizeram parte da minha trajetória acadêmica: os professores, amigos e familiares, sem vocês, eu não teria motivos para chegar até aqui. Em especial: professor Aníbal, pela orientação, e Paula e Isabela, por tornarem os momentos dedicados a escrever esse trabalho bem mais divertidos.

RESUMO

As atividades de mineração impactam significativamente os recursos hídricos devido ao alto consumo de água e à geração de efluentes que exigem tratamento adequado antes do descarte. Neste contexto, wetlands construídos têm se destacado como uma alternativa sustentável para o tratamento dessas águas. Este estudo teve como objetivo aplicar e avaliar o modelo matemático W-C para prever a redução de turbidez em wetlands subsuperficiais horizontais por meio de dados observados em um sistema em escala piloto a fim de encontrar o melhor valor do parâmetro de velocidade de sedimentação que se ajusta aos dados e avaliar a possibilidade da aplicação em escala maior. O experimento foi realizado com tanques de tratamento que utilizavam brita 1 como material suporte e a planta Typha domingensis como macrófita. Para o modelo matemático, foram utilizadas as variáveis conhecidas: turbidez inicial, número de tanques em série, altura da lâmina d'água e tempo de retenção hidráulica. Primeiramente, foi separado os dados observados em um conjunto de 70% para realizar a calibração do modelo, enquanto com conjunto de 30%, foi realizada a validação. O parâmetro velocidade de sedimentação foi otimizado mediante dois métodos: Particle Swarm Optimization (PSO) e Gradiente Reduzido Generalizado, da ferramenta Solver no Excel. Os resultados obtidos foram, w= 0,669 m/dia e w = 0,698 m/dia, consecutivamente. Esses resultados foram analisados por meio das métricas: coeficiente de determinação (R²), Eficiência de Nash-Sutcliffe (NSE) e viés percentual (PBIAS), tanto para os dados de calibração quanto de validação, resultando em $R^2 = 0.822$ e 0,754, NSE = 0,81 e 0,75 PBIAS=-7,06% e -4,04%, no qual demonstraram que o modelo analisado é capaz de representar com boa eficiência a predição da redução de turbidez para o tratamento analisado.

Palavras-chave: modelo matemático w-C, efluente de mineração, PSO, tratamento de efluentes, turbidez, sustentabilidade.

ABSTRACT

Mining activities significantly impact water resources due to high water consumption and the generation of effluents that require proper treatment before disposal. In this context, constructed wetlands have emerged as a sustainable alternative for treating these waters. This study aimed to apply and evaluate the W-C mathematical model to predict turbidity reduction in horizontal subsurface flow wetlands using observed data from a pilot-scale system, in order to determine the best-fit sedimentation velocity parameter and assess the feasibility of large-scale application. The experiment was conducted using treatment tanks filled with gravel as the support medium and Typha domingensis as the macrophyte. The mathematical model incorporated known variables: initial turbidity, number of tanks in series, water depth, and hydraulic retention time. The observed data were divided into two sets—70% for model calibration and 30% for validation. The sedimentation velocity parameter (w) was optimized using two methods: Particle Swarm Optimization (PSO) and the Generalized Reduced Gradient (GRG) algorithm via Excel's Solver tool. The optimized values obtained were w = 0.669 m/day and w = 0.698 m/day, respectively. The results were evaluated using performance metrics: the coefficient of determination (R²), Nash-Sutcliffe Efficiency (NSE), and percent bias (PBIAS) for both calibration and validation datasets. The values obtained were $R^2 = 0.822$ and 0.754, NSE = 0.81 and 0.75, and PBIAS = -7.06% and -4.04%, respectively. These results demonstrate that the model effectively predicts turbidity reduction in the studied treatment system, indicating good predictive efficiency and potential for broader application.

Keywords: w-C mathematical model, mining effluents, PSO, effluent treatment, turbidity, sustainability.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Esquema de wetland subsuperficial	11
Figura 2: Programa em Pyhton	22
Figura 3: Ferramenta Solver	24
Figura 4: Código PSO – parte 1	25
Figura 5: Código PSO – parte 2	26
Figura 6: Código PSO – parte 3	26
Figura 7: Execução do código	27
Figura 8: Dispersão dos dados observados e simulados na fase de calibração	30
Figura 9: Dispersão dos dados observados e simulados na fase de validação	30
Figura 10: Variação dos dados observados e simulados das amostras na fase de calibração	31
Figura 11: Variação dos dados observados e simulados das amostras na fase de validação	31

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Índices de Eficiência de Nash-Sutcliffe	19
Tabela 2: Índices de Eficiência do PBIAS	20
Tabela 3: Colunas do Excel para cálculo do NSE	27
Tabela 4: Valores do erro médio e w para as duas ferramentas de otimização	29
Tabela 5: Valores encontrados para os indicadores analisados nas duas fases	29

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Cf	Concentração final
Ci	Concentração inicial
C*	Concentração descendente uniforme
DP	Desvio padrão
GRG	Gradiente reduzido generalizado
G	taxa de geração de sólidos transportáveis
h	Altura da lâmina d'água
L	Comprimento
Linf	Limite inferior
L_{sup}	Limite superior
Ν	Número de tanques em série
NSE	Eficiência de Nash-Sutcliffe
obs	observado
PBIAS	Percent Bias
PSO	Particle Swarm Optization
R	Taxa de ressuspensão
R ²	Coeficiente de determinação
R ² sim	Coeficiente de determinação simulado
R ² sim t	Coeficiente de determinação simulado Tempo
R ² sim t Ti	Coeficiente de determinação simulado Tempo Turbidez inicial
R ² sim t Ti Tf	Coeficiente de determinação simulado Tempo Turbidez inicial Turbidez final
R ² sim t Ti Tf u	Coeficiente de determinação simulado Tempo Turbidez inicial Turbidez final Velocidade superficial da água
R ² sim t Ti Tf u uT	Coeficiente de determinação simulado Tempo Turbidez inicial Turbidez final Velocidade superficial da água Unidade de turbidez

SUMÁRIO

1. I	NTRODUÇÃO	11
1.1. 0	OBJETIVO	12
1.1.1.	. Objetivos específicos	12
2. F	REVISÃO DE LITERATURA	13
2.1. V	WETLANDS CONSTRUÍDOS	13
2.2. F	REDUÇÃO DE TURBIDEZ EM WETLANDS	14
2.3. N	MODELO W-C	15
2.4. F	FERRAMENTAS DE OTIMIZAÇÃO	16
2.4.1.	. Gradiente Reduzido Generalizado e Solver	16
2.4.2.	. Particle Swarm Optimization	17
2.5. F	FERRAMENTAS DE ANÁLISE DE DESEMPENHO DE MODELOS	
2.5.1.	. Coeficiente de determinação (R ²)	
2.5.2.	. Eficiência De Nash-Sutcliffe (NSE)	
2.5.3.	. Percent Bias (PBIAS)	19
3. N	METODOLOGIA	21
3.1. 0	DRIGEM DOS DADOS	21
3.2. Т	FRATAMENTO DOS DADOS	21
3.2.1.	. Calibração	23
3.2.2.	. Validação	24
3.3. P	PARTICLE SWARM OPTIMIZATION	25
3.4. <i>A</i>	AJUSTE DO MODELO	27
3.4.1.	. Coeficiente de Determinação (R ²)	27
3.4.2.	. Nash-Sutcliffe Efficiency (NSE)	27
3.4.3.	. Percent Bias (PBIAS)	28

4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	.29
5.	CONCLUSÃO	.33
6.	REFERÊNCIAS	.34

1. INTRODUÇÃO

As atividades de mineração geram diversos impactos ambientais e sociais em função de suas operações, especialmente devido à intensa utilização de água em seus processos, como no beneficiamento e separação do minério, aplicação em áreas de lavra e controle de poeira durante o transporte. Entre os principais efeitos negativos dessa atividade, pode-se destacar a contaminação, o assoreamento e a degradação de rios e reservatórios, que resultam em alterações significativas na qualidade e disponibilidade dos recursos hídricos (Gomide *et al.*, 2018).

Os efluentes provenientes das atividades de mineração, quando não tratados adequadamente, representam um risco ambiental e não podem ser descarregados diretamente na rede hidrográfica. A fim de evitar danos aos ecossistemas aquáticos do entorno, esses efluentes devem ser acumulados em barragens de evaporação ou submetidos a um tratamento adequado que garanta uma qualidade aceitável para seu descarte (ANA, 2006).

Em relação ao processo de tratamento de efluentes para o setor minerário, a manutenção dos parâmetros de qualidade é essencial para a proteção ambiental, uso seguro e eficiente dos recursos hídricos. Nesse sentido, soluções baseadas na natureza têm ganhado destaque como alternativas sustentáveis e de baixo custo, que buscam reproduzir processos naturais para realizar o tratamento de efluentes. Nesse contexto, os *wetlands* construídos – sistemas artificiais projetados para replicar funções de zonas alagadas naturais – têm se destacado. Esses sistemas se destacam não apenas pela eficácia na remoção de poluentes, mas também pela relevância ecológica, econômica e social. Eles utilizam plantas aquáticas (macrófitas), processos microbiológicos, físicos e químicos para a remoção de nutrientes, elementos potencialmente tóxicos, matéria orgânica, entre outros poluentes, promovendo a melhoria da qualidade da água de forma eficiente e ecologicamente viável (Ribeiro & De Souza, 2022).

A qualidade da água pode ser avaliada por meio de diversos parâmetros físicos, químicos e biológicos. Dentre os principais parâmetros físicos e químicos, destacam-se: temperatura, oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio, nitrogênio amoniacal, fósforo total, sólidos, turbidez (objeto deste estudo) e pH. Enquanto os parâmetros biológicos incluem a presença e concentração de microrganismos (Bonifácio & Nóbrega, 2021).

A modelagem matemática tem se mostrado uma ferramenta valiosa para prever o desempenho de *wetlands* construídos, permitindo a análise e a otimização em diferentes tipos de tratamentos. Esses modelos baseiam-se em equações que descrevem os processos físicos, químicos e biológicos envolvidos na remoção de poluentes, possibilitando a simulação do

comportamento do sistema sob diferentes condições operacionais. A partir da modelagem, é possível estimar a eficiência do tratamento, avaliar o tempo de retenção hidráulica ideal, prever a remoção de nutrientes e elementos potencialmente tóxicos e comparar diferentes configurações de projeto. Dessa forma, esses modelos permitem não apenas otimizar e comparar diferentes abordagens, mas também prever as condições ideais a serem aplicadas para maximizar a eficiência do tratamento. (Kadlec e Wallace, 2008; Lautenschlager, 2001). Nesse estudo, será utilizado o modelo w-C, desenvolvido por Kadlec e Wallace.

1.1. OBJETIVO

Aplicar e avaliar a calibração do modelo matemático w-C para a predição da redução de turbidez de *wetlands* construídos subsuperficiais horizontais, analisando os vieses de predição mediante dados observados e dados simulados.

1.1.1. Objetivos específicos

- Calibrar e validar o modelo matemático w-C a fim de simular a redução de turbidez utilizando dados observados de *wetlands* construídos em escala piloto.
- Avaliar a capacidade preditiva do modelo em termos de métricas de ajuste coeficiente de determinação (R²), coeficiente de eficiência de Nash-Sutcliffe (NSE) e viés percentual (PBIAS) - para determinar a precisão da predição.
- Comparar as ferramentas de otimização *Particle Swarm Optimization* (PSO) e Gradiente Reduzido Generalizado e analisar os resultados do modelo.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1. WETLANDS CONSTRUÍDOS

Wetlands construídos (WC), são sistemas alagados artificiais projetados para replicar as funções de ambientes naturais, como mangues e pântanos. Esses sistemas são amplamente empregados no tratamento de águas residuárias oriundas de diversas fontes, incluindo esgotos domésticos e efluentes de processos industriais (Teixeira *et al.*, 2021).

Na construção de *wetlands*, diversos fatores devem ser considerados para garantir sua eficiência, como a geometria do tanque, a taxa de aplicação hidráulica, a carga iônica e o tempo de retenção hidráulica (MetCalf & Eddy,1991). O tratamento dos efluentes ocorre por meio de processos físicos, como sedimentação e filtração, bioquímicos, como precipitação e absorção. Durante esse processo, o efluente percola através da camada radicular da vegetação e do material suporte presentes nos *wetlands*, promovendo a remoção de poluentes (Shelef *et al.*, 2013).

Os *wetlands* construídos podem ser classificados em três tipologias diferentes de acordo com o fluxo da lâmina d'água, sendo elas: *wetlands* de fluxo superficial, subsuperficial e vertical, cada um com características e vantagens distintas. Os *wetlands* de fluxo superficial possuem lâmina de água visível, podendo apresentar vegetação. Nos *wetlands* de fluxo vertical, o efluente é aplicado em lotes na superfície do leito, formando uma lâmina de água que percola e drena verticalmente por gravidade através dos poros do material suporte (Kadlec & Wallace, 2008).

Os *wetlands* de fluxo subsuperficial, ênfase deste estudo, utilizam material suporte em conjunto com vegetação típica, conhecidas como macrófitas. Esses sistemas são projetados para tratar efluentes primários antes de sua dispersão no solo ou descarga em corpos hídricos. Nessa tipologia, os efluentes permanecem abaixo da superfície do material suporte, percorrendo a região da rizosfera das macrófitas, conforme esquematizado na Figura 1 (Kadlec & Wallace, 2008).

Figura 1: esquema de wetland subsuperficial



Fonte: Kadlec & Wallace (2008)

A aplicação de *wetlands* construídos no setor minerário tem se mostrado uma alternativa eficiente e sustentável para o tratamento de efluentes. Os *wetlands* são capazes de remover diferentes poluentes comumente encontrados nos efluentes desse setor, como o Ferro (Fe) e Manganês (Mn) e a turbidez (Sheoran & Sheoran, 2006).

Um dos beneficios dos *wetlands* construídos na mineração é a redução da turbidez dos efluentes. A retenção de partículas suspensas ocorre devido à ação combinada da vegetação e do material suporte, que promovem a sedimentação e a filtração. Isso melhora significativamente a qualidade da água tratada antes de seu descarte em corpos hídricos naturais (Mitsch & Gosselink, 2015).

Estudos de caso demonstram a eficácia dos wetlands construídos no tratamento de efluentes minerários. Em uma pesquisa realizada por Stefanatou *et al.*, 2023 demonstram eficiências de remoção de turbidez superiores a 80% nesses sistemas quando adequadamente dimensionados (Stefanatou *et al.*, 2023).

Portanto, os *wetlands* construídos representam uma alternativa promissora para o tratamento de efluentes da mineração, contribuindo para a mitigação dos impactos ambientais associados à atividade minerária e para a preservação da qualidade dos recursos hídricos.

2.2. REDUÇÃO DE TURBIDEZ EM WETLANDS

A turbidez é um parâmetro físico de qualidade da água que mede a sua opacidade ou transparência, sendo causada principalmente pela presença de material em suspensão, como sedimentos, argila, matéria orgânica e outros contaminantes (Falcade *et al.*, 2017).

No Brasil, os padrões de qualidade da água, incluindo os limites de turbidez, são estabelecidos pela Resolução CONAMA 357/2005. Essa resolução classifica os corpos d'água em diferentes categorias (de especial a 4) e define os valores máximos permitidos para turbidez conforme o uso da água (abastecimento, recreação, irrigação, etc.). Para corpos d'água classe 1,

por exemplo, que são destinados ao abastecimento humano após tratamento simplificado, a turbidez não pode ser superior a 40 uT (BRASIL, 2005).

A remoção de turbidez por meio de *wetlands* construídos ocorre predominantemente por meio de processos físicos, como a sedimentação e a filtração. A eficiência desse processo depende dos parâmetros de projeto escolhidos, como o tipo de macrófitas e o material de suporte utilizado (Kasenene, 2023). As macrófitas desempenham um papel essencial na detenção de material particulado em suspensão, principalmente por meio de suas raízes. Essa capacidade de detenção aumenta à medida que a densidade da cobertura vegetal se torna maior (Opitz *et al.*, 2021).

Além disso, o material de suporte, como as britas, atua como um meio filtrante, favorecendo a remoção de sólidos suspensos ao reter essas partículas à medida que o efluente percola pelo meio (Kadlec & Wallace, 2008). A seleção adequada desses componentes é fundamental para otimizar a remoção de turbidez, uma vez que a espécie de macrófitas e a granulometria do material de suporte influenciam diretamente a eficiência do sistema.

2.3. MODELO W-C

O presente estudo utilizou como base o modelo *w*-C*, desenvolvido por Kadlac e Wallace (2008), um modelo matemático empregado para simular os efeitos da sedimentação de sólidos suspensos totais (SST) em sistemas de *wetlands* construídos. Os dados experimentais observados desta pesquisa foram medidos em unidades de turbidez (uT). Dessa forma, os parâmetros do modelo, originalmente expressos em concentração (mg.L⁻¹) foram adaptados para testar a hipótese da predição utilizando de unidade de turbidez como unidade de medida. O modelo é inicialmente representado pela Equação 1:

$$\mathbf{w}\mathbf{C}^* = G + R \tag{1}$$

onde:

w: velocidade de sedimentação (m/dia);

C*: concentração descendente uniforme (mg. L^{-1});

G: taxa de geração de sólidos transportáveis (g/m².dia);

R: taxa de ressuspensão (g/m².dia).

Assumindo que a geração e ressuspensão dos sólidos são constantes em todo o *wetland*, a Equação 1 pode ser reescrita como (Equação 2):

$$u h \frac{dC}{dx} = w(C^* - C) \tag{2}$$

onde:

u: velocidade superficial da água (m/dia);

h: altura da lâmina d'água (m).

Ao integrar a equação considerando as concentrações na entrada e na saída do sistema, obtémse (Equação 3):

$$\frac{(Cf - C^*)}{(Ci - C^*)} = exp\left(-\frac{wL}{uh}\right) = exp\left(-\frac{wt}{h}\right)$$
(3)

onde:

Cf: concentração final (mg.L⁻¹)

Ci: concentração inicial (mg.L⁻¹)

L: comprimento do tanque (m)

t: tempo de retenção hidráulica (dia)

Considerando a existência de *N* tanques equivalentes em série, a equação assume a forma (Equação 4):

$$\frac{(Cf-C^*)}{(Ci-C^*)} = \left(1 + \frac{wt}{Nuh}\right)^{-N} = \left(1 + \frac{wt}{Nh}\right)^{-N}$$
(4)

onde:

N = número de tanques em séries

Esse modelo é utilizado para descrever a sedimentação de sólidos suspensos em *wetlands* construídos, permitindo prever a remoção de poluentes ao longo do sistema.

2.4. FERRAMENTAS DE OTIMIZAÇÃO

2.4.1. Gradiente Reduzido Generalizado e Solver

O método Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) é uma técnica de otimização nãolinear desenvolvida por Abadie e Carpentier (1966) baseada em aprimoramentos do Método do Gradiente Reduzido de Wolfe. O GRG surgiu como uma alternativa simplificada e mais eficiente para lidar com problemas de otimização que envolvem restrições lineares, superando limitações presentes em métodos anteriores (Rosen, 1960; Graves & Wolfe, 1963).

Desde sua criação, o GRG tem se destacado por sua eficiência e já foi implementado computacionalmente em diferentes plataformas, sendo inicialmente programada em Fortran. O método ganhou grande relevância comercial quando a *Frontline Systems Inc.* adquiriu seus direitos e o incorporou à sua linha de produtos. Posteriormente, a empresa estabeleceu uma parceria com a *Microsoft*, integrando o GRG à ferramenta Solver do Microsoft Excel, que ampliou significativamente seu alcance. Atualmente, o Solver baseado no GRG está presente em milhões de cópias do *Microsoft Office*, tornando a otimização não-linear acessível a usuários sem necessidade de conhecimentos avançados em programação (Sacoman, 2012).

A ferramenta Solver é utilizada para encontrar um valor ótimo para uma função objetivo definida pelo usuário, podendo maximizar ou minimizar determinado valor. A partir desse objetivo, especificam-se quais as variáveis poderão ser alteradas e quais as restrições. O Excel Solver, então, ajusta iterativamente os valores das variáveis de decisão para otimizar a função objetivo, respeitando as restrições impostas (Barati, 2013).

2.4.2. Particle Swarm Optimization

O *Particle Swarm Optimization* (PSO) ou Otimização por Enxames de Partículas, é um algoritmo de otimização baseado em inteligência coletiva, inspirado no comportamento de enxames naturais, como bandos de pássaros e cardumes de peixes, foi desenvolvido por James Kennedy e Russell Eberhart em 1995. A ideia inicial do algoritmo tinha como objetivo encontrar a melhor solução explorando interações sociais, ao invés de depender unicamente das habilidades cognitivas puramente individuais das partículas (Poli *et al.*, 2007).

O funcionamento do PSO baseia-se na interação de várias partículas distribuídas no espaço de busca de um problema. Cada partícula representa uma possível solução e ajusta sua posição iterativamente para alcançar o melhor resultado. Esse ajuste ocorre com base em três fatores: o histórico da própria partícula (posição atual e melhor posição encontrada até o momento), informações compartilhadas por outras partículas do enxame e perturbações aleatórias que mantêm a diversidade na busca. Cada partícula é caracterizada por três vetores em um espaço de dimensão D: posição atual (xi), melhor posição anterior (pi) e velocidade (vi), que determina o deslocamento no espaço de busca.

A cada iteração, a função objetivo é avaliada na posição atual da partícula. Se essa nova posição for melhor do que a melhor posição registrada anteriormente, ela é atualizada como *pi*. Além disso, o melhor valor encontrado no enxame é registrado como *pbest*. Com base nessas informações, a velocidade e a posição das partículas são ajustadas continuamente, levando o enxame a convergir para uma solução ótima (Poli *et al.*, 2007).

2.5. FERRAMENTAS DE ANÁLISE DE DESEMPENHO DE MODELOS

2.5.1. Coeficiente de determinação (R²)

O coeficiente de determinação (\mathbb{R}^2) é uma medida que indica a proporção da variabilidade da variável dependente (y) explicada pela variável independente (x) em um modelo de regressão. Ele varia entre 0 e 1, onde valores próximos de 1 indicam que a maior parte da variabilidade em y é explicada pelo modelo. O \mathbb{R}^2 é calculado considerando a diferença entre a variabilidade total em y (representada pela soma total dos quadrados, SSt) e a variabilidade restante após considerar x (representada pela soma dos quadrados dos resíduos, SSRes), (Montgomery *et al.*, 2006) como mostrado abaixo na Equação 5:

$$R^2 = \frac{SSr}{SSt} = 1 - \frac{SSres}{SSt}$$
(5)

onde:

SSres = soma dos quadrados dos resíduos,

SSt = soma total dos quadrados,

SSr = soma dos quadrados da regressão.

2.5.2. Eficiência De Nash-Sutcliffe (NSE)

A eficiência de Nash-Sutcliffe (NSE) é uma estatística normalizada que determina a magnitude relativa da variação dos resíduos em comparação com a variância dos dados medidos (Nash e Sutcliffe, 1970). Em outras palavras, indica quão bem o modelo se ajuste entre as séries de dados observados. O NSE é calculado conforme mostrado na Equação 6:

NSE = 1 -
$$\left[\frac{\Sigma(Yi_{obs} - Yi_{sim})^2}{\Sigma(Yi_{obs} - Y_{média})^2}\right]$$
(6)

onde:

Yi_{obs}: dado observado *Yi_{sim}*: dado simulado Y_{média}: média dos dados observados

O NSE é importante para complementar o coeficiente de determinação, pois o R² não indica necessariamente se o modelo de regressão é adequado. Ou seja, o R² não distingue entre superestimações e subestimações e pode não refletir adequadamente a capacidade preditiva do modelo em relação aos valores médios dos dados observados (Quinino *et al.*, 2011).

A classificação da precisão dos dados de acordo com o índice NSE é indicado na Tabela 1.

TT 1 1 1	ź 1.	1	$1 \ NT \ 1 \ C \ (1)^{10}$
Tabela I	: Indices	de Eficiencia	a de Nash-Sutcliffe

Índice de avaliação do desempenho do modelo	Classificação da precisão dos dados
$0,75 < NSE \le 1,00$	Muito boa
$0,65 < NSE \le 0,75$	Boa
$0,50 < NSE \le 0,65$	Satisfatória
$NSE \leq 0,50$	Insatisfatória

Fonte: Adaptado de Moriasi et al. (2007).

2.5.3. Percent Bias (PBIAS)

Percent bias (PBIAS), ou viés percentual, mede a tendência média dos dados simulados serem maiores ou menores do que seus correspondentes observados. O valor ideal do PBIAS é 0 (zero). Valores positivos indicam um viés de subestimação do modelo, enquanto valores negativos indicam um viés de superestimação do modelo (Gupta *et al.*, 1999).

PBIAS é calculado de acordo com Equação 7 apresentada a seguir:

$$PBIAS = \left[\frac{\Sigma(Yi \ obs - Yi \ sim) * 100}{\Sigma(Yi \ obs \)}\right]$$
(7)

onde:

Yiobs: dado observado

Yisim: dado simulado

A classificação da precisão dos dados de acordo com o PBIAS (%) é indicado na Tabela 2.

Índice de avaliação do desempenho do modelo	Classificação da precisão dos dados
PBIAS $\leq \pm 10$	Muito boa
$\pm 10 \leq PBIAS \leq \pm 15$	Boa
$\pm 15 \leq PBIAS \leq \pm 25$	Satisfatória
$PBIAS \le \pm 25$	Insatisfatória

Tabela 2: Índices de Eficiência do PBIAS

. Fonte: Adaptado de Moriasi et al. (2007).

3. METODOLOGIA

3.1. ORIGEM DOS DADOS

Os dados utilizados nesta pesquisa foram extraídos do estudo de Gomes *et al.* (2024), que investigou o desempenho de diferentes macrófitas e materiais suporte em *wetlands* construídos de fluxo subsuperficial horizontal para a redução da turbidez de águas de escoamento superficial provenientes da mineração. O experimento original foi delineado por três células para cada linha de tratamento. As amostragens foram realizadas diretamente nos drenos de coleta, três vezes por semana, especificamente às segundas, quartas e sextas-feiras, sempre no período da manhã, com tempo de retenção hidráulica (TRH) de 2, 4 e 6 dias.

Os dados fornecidos para esse trabalho foram: turbidez inicial, turbidez final em cada um dos tempos de retenção, temperatura e altura da lâmina d'água. A linha de tratamento escolhida para esse estudo utilizou a planta *Typha domingensis* como macrófita e brita 1 como material suporte.

3.2. TRATAMENTO DOS DADOS

O tratamento dos dados e realização dos cálculos foi conduzido através do *software* Microsof Excel. Os dados brutos foram recebidos em planilhas eletrônicas e, inicialmente, foi feita a separação das leituras individuais em colunas identificadas por: data, temperatura, turbidez inicial (uT), turbidez final (uT), tempo (dias) e altura do piezômetro (m). Considerando que os valores de entrada do experimento (turbidez inicial) limitavam-se a 3000uT, amostras que excederam esse valor foram removidas da análise.

Em seguida, foi feita a identificação e a remoção dos *outliers* (pontos que desviam da distribuição principal dos dados) por meio do cálculo da média aritmética e do desvio padrão dos dados, os quais foram utilizados para determinar os limites inferior (L_{inf}) e superior (L_{sup}). Essa abordagem estatística permitiu identificar os pontos que apresentavam valores anormais em relação ao comportamento esperado do conjunto de dados. A remoção dos *outliers* é essencial para evitar distorções na análise e levar a erros no ajuste de modelos matemáticos, dificultando a calibração e validação (Wang *et al.*, 2023). Para a definição dos limites, foram utilizadas as Equações 8 e 9 a seguir:

$$L_{inf} = M\acute{e}dia - 2 \times DP \tag{8}$$

$$L_{sup} = M\acute{e}dia + 2 \times DP \tag{9}$$

onde: L_{inf}: Limite inferior L_{sup}: Limite superior DP: Desvio Padrão

Os dados válidos foram utilizados para a simulação utilizando o modelo escolhido. Os dados experimentais válidos foram enumerados de 1 a 156 a fim de serem divididos em dois grupos, sendo o conjunto para calibração composto por 70% dos dados e o conjunto de validação com os 30% restantes. A seleção dos dados foi realizada de forma aleatória para cada conjunto utilizando a linguagem Python no ambiente de desenvolvimento Thonny, por meio do módulo *random*, que gera amostras pseudoaleatórias a partir de um gerador de números pseudoaleatórios baseado no algoritmo *Mersenne Twister*. A validação do modelo foi realizada aplicando os valores calibrados de w aos dados de validação. O código utilizado nessa etapa está ilustrado na Figura 2.

Figura 2: programa em Pyhton.

```
1 #Programa para sortear os 70/100 dos valores para usar no modelo wC
2 import random
3 import math
4 n = int(input("Tamanho da amostra: "))
5 n70 = math.ceil(0.7*n)
6
7 random_numbers = random.sample(range(1, n + 1), n70)
8 random_numbers.sort()
9 print(random numbers)
```

Fonte: Elaborado pela autora (2025).

Para a aplicação do modelo matemático, a fim de encontrar os resultados desejados, foi feito um rearranjo da Equação 4 de modo a expressar o parâmetro Tf (turbidez final), originalmente apresentado como Cf, em função dos demais parâmetros e variáveis, conforme demonstrado na Equação 10 abaixo.

$$Tf = C^* + \left(1 + \frac{wt}{Nh}\right)^{-N} * (Ti - C^*)$$
(10)

Os valores de Ti, Tf, h, N e t foram obtidos a partir da coleta de dados durante a execução do experimento, enquanto o valor de C* foi fixado em 1 uT, uma escolha fundamentada na turbidez desejada e esperada ao final do tratamento do efluente. O parâmetro *w*, foi arbitrariamente definido em 1, sendo esta etapa necessária para que a ferramenta Solver do Excel pudesse trazer um resultado inicial. Posteriormente, esse valor foi otimizado primeiramente por meio da ferramenta Solver do Excel e pelo algoritmo PSO para refinamento dos resultados

3.2.1. Calibração

A calibração do modelo foi realizada utilizando o subconjunto A dos dados experimentais coletados, que corresponde a 70% do total de amostras disponível. Esta etapa teve como objetivo principal ajustar os parâmetros do modelo de forma que as saídas simuladas apresentassem a maior concordância possível dos dados observados, garantindo assim que o modelo represente com precisão os processos que ocorrem no *wetland* construído estudado. Para a implementação do processo de calibração, foi criada no Excel uma coluna denominada "Tf simulada", cujos valores foram calculados através da Equação 11:

Tfsim = 1 +
$$\left(1 + \frac{1}{3}\frac{T}{h}\right)^{-3} * (Ci - 1)$$
 (11)

A avaliação do desempenho do modelo foi realizada mediante o cálculo do erro quadrático entre os valores observados (Tfobs) e simulados (Tfsim). Para tanto, foi criada uma coluna específica contendo o quadrado das diferenças [(Tfobs - Tfsim)²], cujo somatório foi posteriormente utilizado como função objetivo no processo de otimização.

A otimização do parâmetro w foi realizada através da ferramenta Solver do Excel (Figura 3), empregando o método GRG Não Linear. O processo iterativo teve como objetivo minimizar o somatório dos erros quadráticos (célula L122), ajustando automaticamente o valor do parâmetro w (célula I3) até encontrar a solução ótima que proporcionasse a melhor concordância entre os valores simulados e observados de turbidez final.

Definir Objetivo:		\$L\$122		1
Para: () <u>M</u> ás	. 🗿 Mí <u>n</u> .	⊖ <u>V</u> alor de:	0	
Alterando Célula	vari <u>á</u> veis:			
SIS3				1
Sujei <u>t</u> o às Restriç	ões:			
				Adicionar
				Alter <u>a</u> r
				E <u>x</u> cluir
				Redef <u>i</u> nir Tudo
			*	<u>C</u> arregar/Salvar
🗹 Tornar Variáv	eis Irrestritas N <u>ã</u> o Ne	egativas		
S <u>e</u> lecionar um Método de	GRG Não Linear		~	Opções
Método de Solu Selecione o meo Selecione o meo Selecione o meo Evolutionary pa	ição anismo GRG Não Lir anismo LP Simplex p ra problemas do Sol	near para Problemas o Nara Problemas do Sol Ver não suaves.	lo Solver suaves ver lineares. Sele	e não lineares. cione o mecanismo

Figura 3: Ferramenta Solver

Fonte: Elaborado pela autora (2025).

O valor ótimo de *w* obtido neste processo de calibração é apresentado e discutido no capítulo de Resultados e Discussões.

3.2.2. Validação

Após a determinação do parâmetro *w* por meio do Solver, procedeu-se à validação do modelo utilizando o subconjunto B de dados (30% das amostras). Nesta etapa, a Equação 11 foi novamente aplicada, mantendo-se fixo o valor de *w* obtido na calibração, enquanto os demais parâmetros conservaram seus valores originais.

A validação teve como objetivo avaliar a precisão e a robustez do modelo calibrado quando submetido a condições independentes daquelas utilizadas em seu ajuste. Para tanto, os valores de turbidez final simulados (Tfsim) foram comparados com os dados observados (Tfobs) por meio de análises estatísticas, visando quantificar o desempenho preditivo do modelo.

3.3. PARTICLE SWARM OPTIMIZATION

Para otimização do modelo, foi utilizado também o *Particle Swarm Optimization*, onde, inicialmente, foi realizada a calibração do modelo matemático por meio da plataforma de desenvolvimento Google Colab, que oferece um ambiente de desenvolvimento acessível e eficiente para processamento computacional. O código foi implementado em linguagem Python, utilizando a biblioteca *pyswarms*, que fornece métodos para implementação do PSO. O processo de otimização teve como objetivo principal determinar o valor ótimo do parâmetro *w*, que minimizasse as diferenças entre os valores simulados de turbidez final e os valores observados experimentalmente. A implementação do código foi estruturada conforme ilustrado nas Figuras 4, 5 e 6.

Figura 4: código PSO - parte 1

<pre>!pip install pyswarms</pre>			
import numpy as np			
import <mark>pyswarms</mark> as ps			
# Definição das constar	ntes		
C_star = 1 # Turbidez	esperada		
N = 3 # Número de tano	ques		
h = 0.21 # Altura médi	ia da lâmina d'á	gua	
t = np.array <mark>(</mark> [2,2,2,2,2,2	2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,	2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,2	2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,2,
2,2,2,2,2	2,2,2,4,4,4,4,4,4,	4,4,4,4,4,4,4,4,4,4	1,4,4,4,4,4,4,4,4,4,4,4,4,4,4,
4,4,4,4,4	4,4,4,4,4,4,6,6,	6,6,6,6,6,6,6,6,6,6	,6,6,6,6,6,6,6,6,6,6,6,6,6,
6,6,6,6,6	6,6,6,6,6,6,6])		
# Valores de Ci (popula	ação)		
Ci = np.array([1175, 13	372, 1344, 1463,	1616, 1506, 1136,	1375, 1059, 1036, 1304,
1316, 13	339, 1502, 1380,	1107, 1053, 1279,	1116, 1264, 1322, 1786,
1422, 16	663, 1123, 1137,	1179, 1621, 1747,	1049, 1257, 1351, 1777,
1501, 14	428, 1675, 1382,	901, 983, 1065, 13	372, 1344, 1531, 1616,
1506, 11	136, 1375, 1059,	1036, 1304, 1316,	1339, 1053, 1116, 1177,
1679, 17	786, 1422, 1661,	1663, 1123, 1137,	1416, 1747, 1049, 1257,
1777, 12	260, 1566, 1675,	1382, 1386, 1365,	1080, 901, 983, 1372,
1344, 10	616, 1506, 1136,	1375, 1181, 1304,	1316, 1339, 1502, 1107,
1053, 13	320, 1177, 1679,	1322, 1786, 1661,	1123, 1621, 1416, 1747,
1257, 13	351, 1777, 1501,	1428, 1675, 1386,	1365, 901, 983, 1065])

Fonte: Elaborado pela autora (2025).

Figura 5: código PSO – parte 2

```
Valores de Cf observado
Cf_obs = [37.7, 54.6, 83, 32, 45, 48.2, 24.7, 23.2, 43.1, 24.5, 58.2, 62.6,
         56.7, 44.8, 59.2, 35.5, 37.5, 54, 48.7, 47.3, 43.5, 29.4, 48.3, 47.1,
         4.95, 29.9, 40.8, 56.2, 58.9, 14.7, 32.5, 49.9, 82.9, 86.4, 70.9,
         47.7, 64.3, 14.2, 23.3, 42.5, 6.67, 7.1, 9.72, 9.24, 5.38, 3.05, 4.76,
         6.57, 3.9, 9.95, 15.4, 11, 6.35, 7.5, 4.2, 5.54, 4.78, 6.19, 4.92,
         5.42, 2.23, 4.72, 9.24, 9.42, 1.9, 5.15, 11, 14.8, 4.53, 8.68, 8.75,
         7.02, 11, 5.27, 5.73, 4.38, 1.08, 1.68, 2.37, 1.84, 1.43, 1.12, 1.78,
         2.67, 3.36, 2.42, 2.53, 1.01, 1.39, 0.595, 0.497, 0.599, 0.783, 0.724,
         1.11, 1.74, 3.14, 1.93, 1.15, 0.986, 1.51, 1.69, 1.99, 1.33, 1.88,
         1.92, 1.2, 0.686, 0.534, 0.805]
# Função objetivo: minimizar a diferença entre Cf sim e Cf obs
def objective_function(w_array):
   w_array = np.atleast_1d(w_array)
   errors = []
   for w in w array: # Itera sobre os valores de w testados
       Cf_sim = C_star + (1 + (w * t) / (N * h))**(-N) * (Ci - C_star)
       error = np.mean((Cf_sim - Cf_obs) ** 2) # Erro quadrático médio (MSE)
       errors.append(error)
   return np.array(errors)
                            # Retorna um array com os erros
```

Fonte: Elaborado pela autora (2025).

Figura 6 : código PSO - parte 3

Fonte: Elaborado pela autora (2025).

A execução do código está representada na Figura 7, abaixo.

Figura 7: execução do código

Fonte: Elaborado pela autora (2025).

3.4. AJUSTE DO MODELO

Para a avaliação quantitativa do ajuste do modelo w-C*, foram empregados três indicadores estatísticos: coeficiente de determinação (R²), eficiência de Nash-Sutcliffe (NSE) e viés percentual (PBIAS). Essas métricas permitiram uma análise abrangente do desempenho do modelo, possibilitando: (1) avaliar a correlação entre valores observados e simulados (R²), (2) verificar a eficiência preditiva do modelo (NSE), e (3) quantificar a tendência sistemática de sub ou superestimação (PBIAS).

O procedimento de avaliação foi aplicado de forma sistemática tanto para o conjunto de calibração quanto para o de validação, seguindo rigorosamente as mesmas etapas metodológicas descritas nas seções 3.4.1 (preparação dos dados), 3.4.2 (aplicação do modelo) e 3.4.3 (cálculo dos indicadores).

3.4.1. Coeficiente de Determinação (R²)

O coeficiente de determinação (R²) foi calculado a partir das colunas contendo os dados observados e simulados, mediante análise de regressão linear entre os valores observados (eixo x) e simulados (eixo y). Utilizando as ferramentas gráficas do Excel, foi elaborado um gráfico de dispersão, ao qual se ajustou uma reta de regressão linear. O R², que expressa a proporção da variância nos dados observados explicada pelo modelo, foi obtido diretamente como resultado deste ajuste.

3.4.2. Nash-Sutcliffe Efficiency (NSE)

O cálculo do NSE foi realizado por uma planilha Excel. Inicialmente, criou-se uma coluna para calcular as diferenças quadráticas entre cada par de valores observados e simulados. Paralelamente, determinou-se a média dos valores observados e calculou-se em outra coluna as diferenças quadráticas entre cada valor observado e a média, conforme Tabela 3 abaixo.

Tabela 3: colunas do Excel para cálculo do NSE.

Tf obs Tf sim (Tf sim – Tf obs) ² ((Tf obs - média Tf obs) ²
--	--------------------------------------

3.4.3. Percent Bias (PBIAS)

O PBIAS foi calculado para avaliar a tendência sistemática do modelo em superestimar ou subestimar os valores reais. A análise do PBIAS envolveu a criação de uma coluna com as diferenças simples entre valores observados e simulados, cujo somatório foi multiplicado por 100 e posteriormente dividido pelo somatório total dos valores observados. Um PBIAS próximo de zero indica ausência de viés sistemático, enquanto valores positivos revelam tendência de subestimação e negativos de superestimação pelos valores simulados. Ambos os indicadores foram calculados separadamente para os conjuntos de calibração e validação, permitindo uma avaliação abrangente do desempenho preditivo do modelo em diferentes condições (Moriasi *et al.*, 2007).

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Foi realizada a aplicação dos dois métodos de otimização - Solver e PSO - para calibração do parâmetro *w* (velocidade de sedimentação). O parâmetro de velocidade de sedimentação exerce uma influência direta na eficiência do modelo, determinando a rapidez com que as partículas sólidas alcançam o fundo do leito do sistema. Foram obtidos resultados consistentes, com valores muito próximos: 0,69793 m/dia (Solver) e 0,66895 m/dia (PSO), conforme apresentado na Tabela 4. Esta concordância entre os métodos independentes valida a robustez do processo de calibração e sugere que o modelo está adequadamente parametrizado para representar o sistema estudado.

Tabela 4: Valores do erro médio e *w* para calibração nas duas ferramentas de otimização.

	Solver	PSO
w (m/dia)	0,69793	0,66895
Erro médio	94,70	98,78

Considerando, então, essa similaridade dos dados, optou-se por realizar a análise do parâmetro encontrado pelo método Solver. Os resultados das análises estão sintetizados na Tabela 5 abaixo.

	Fase de calibração	Fase de validação
R ²	0,822	0,754
NSE	0,81	0,75
PBIAS	-7,06	-4,04

Tabela 5: Valores encontrados para os indicadores analisados nas duas fases

A análise dos indicadores de desempenho (Tabela 5) revelou excelente capacidade preditiva do modelo. Os valores de R² (0,822 para calibração e 0,754 para validação) próximos a 1 demonstram que o modelo explica satisfatoriamente a correlação dos dados experimentais. As Figuras 8 e 9, que mostram as relações de dispersão entre valores observados e simulados, confirmam visualmente esta boa correlação.



Figura 8: Dispersão dos dados observados e simulados na fase de calibração

Fonte: Elaborado pela autora (2025).

Figura 9: Dispersão dos dados observados e simulados na fase de validação



Fonte: Elaborado pela autora (2025).

Vale ressaltar que o coeficiente de determinação, usado de maneira isolada, não é suficiente para afirmar a eficácia do modelo, devido às suas limitações, assim, para confirmar a precisão do modelo, foi calculado o coeficiente de eficiência de Nash-Sutcliffe. Os resultados de NSE (0,81 na fase de calibração e 0,75 na fase de validação) apresentaram ótimos resultados para os dados analisados, indicando que o modelo analisado apresenta alta eficiência preditiva. Nash e Sutcliffe (1970) propuseram essa métrica para avaliar a eficiência de modelos em reproduzir a variância dos dados observados, portando, os valores encontrados indicam que o

modelo explica 75% da variabilidade dos dados (fase da validação), sendo correspondente ao limite mínimo para estar na classificação "muito boa" de precisão de dados (Moriasi *et al.* 2007).

Os resultados de PBIAS, com valores de -7,06% (calibração) e -4,04% (validação), também classificados como "muito boa" precisão, revelam uma leve tendência do modelo em superestimar os valores reais, sugerindo ajustes pontuais, mas que não compromete a utilidade do modelo, segundo Gupta *et al.* (1999).

As Figuras 10 e 11, que apresentam a variação temporal dos valores observados e simulados, demonstram que o modelo captura adequadamente a dinâmica do sistema ao longo dos diferentes tempos de retenção hidráulica.











Fonte: Elaborado pela autora (2025).

Na etapa de calibração, o modelo apresentou bons índices de desempenho estatístico, evidenciados por valores elevados de R² e NSE, o que demonstra que a simulação foi capaz de reproduzir satisfatoriamente a tendência geral dos dados observados de turbidez. No entanto, observou-se um valor negativo de PBIAS, indicando a presença de superestimação sistemática dos dados simulados em relação aos observados. Essa superestimação é visível no gráfico, sobretudo nos períodos de menor turbidez, onde a linha representando os valores simulados (vermelha) permanece consistentemente acima da linha dos dados observados (azul).

Durante a etapa de validação, o modelo manteve a capacidade de representar a tendência dos dados, com os índices R² e NSE ainda em faixas consideradas satisfatórias, confirmando a robustez do ajuste. No entanto, o padrão de superestimação, embora menos acentuado, ainda está presente, o que pode ser confirmado pela manutenção de um PBIAS levemente negativo. Essa característica é mais evidente nas amostras iniciais, que apresentam valores elevados de turbidez. Nessas condições, o modelo tende a subestimar os picos de turbidez e superestimar os valores médios e baixos, sugerindo que há limitações na reprodução de eventos extremos.

Esses resultados indicam que, apesar do bom desempenho geral, o modelo pode se beneficiar de ajustes nos parâmetros relacionados a eventos de maior intensidade ou processos dinâmicos de rápida variação da turbidez, de forma a reduzir o viés sistemático e melhorar a acurácia preditiva, principalmente em condições críticas.

5. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos neste estudo demonstraram que a adaptação do modelo matemático desenvolvido por Kadlec e Wallace (2008), realizado para esta pesquisa, apresentou eficiência significativa na predição da redução de turbidez em *wetlands* construídos de fluxo subsuperficial utilizando *Typha domingensis* como macrófita e brita 1 como material suporte. A consistência observada entre os valores do parâmetro *w* obtidos pelos diferentes métodos de otimização (Solver e PSO) reforça a robustez do processo de calibração realizado, com ambos os métodos produzindo resultados muito próximos (0,69793 m/dia pelo Solver e 0,66895 m/dia pelo PSO).

A análise do modelo através das métricas estatísticas - com R² superior a 0,75, NSE acima de 0,7 e PBIAS abaixo de 10% em módulo para ambas as fases de calibração e validação - comprova sua capacidade preditiva e confiabilidade. As análises gráficas da calibração e validação reforçam esse desempenho, mostrando que o modelo simula bem as oscilações de turbidez, ainda que apresente leve superestimação especialmente em valores mais baixos. Tal comportamento é comum em sistemas com elevada variabilidade inicial, como visto nas primeiras amostras Esses resultados indicam que o modelo adaptado pode ser aplicado com segurança em projetos de tratamento em escala real, permitindo estimar com precisão a turbidez final com base nas variáveis de entrada, como turbidez inicial, número de tanques e tempo de retenção hidráulica.

No entanto, é importante destacar que existem limitações inerentes ao modelo, que devem ser consideradas em sua aplicação. Entre elas, a necessidade de condições operacionais controladas similares às do estudo e a potencial variabilidade dos dados de entrada. Esses fatores podem influenciar diretamente o desempenho do modelo em condições diferentes das estudadas.

Como perspectivas futuras, recomenda-se a realização de estudos complementares para validar e aprimorar o modelo em diferentes contextos e escalas. Além disso, a integração de métodos avançados de análise de dados e simulações podem proporcionar uma compreensão mais detalhada dos processos e aumentar a precisão das previsões.

6. REFERÊNCIAS

ABADIE, J.; CARPENTIER, J., *Généralisation de la Méthode du Gradient Réduit de Wolfe au Cas de Contraintes Nonlinéaires*, Proceedings of the IFORS Congress, Cambridge, Massachusetts, 1966.

AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS E SANEAMENTO BÁSICO (Brasil). A gestão dosrecursos hídricos e a mineração. Brasília: ANA, 2006. 334 p., il., color. + + 1 CD-ROM. ISBN85-89629-18-X.Disponívelhttps://biblioteca.ana.gov.br/sophia_web/acervo/detalhe/3797.Acesso em: 26 out. 2024.

BARATI, R. Application of Excel Solver for parameter estimation of the nonlinear Muskingum models. *KSCE Journal of Civil Engineering*, v. 17, p. 1139–1148, 2013. DOI: <u>https://doi.org/10.1007/s12205-013-0037-2</u>.

BRASIL. Resolução CONAMA 357, de 17 de março de 2005. Conselho Nacional de Meio Ambiente. Disponível em: <www.mma.gov.br/port/conama/res/res05/res35705.pdf>. Acesso em: 20 fev. 2025.

BONIFÁCIO, C. M.; NÓBREGA, M. T. de. Parâmetros de qualidade da água no monitoramento ambiental. São Carlos: Editora Científica Digital, 2021.

FALCADE, D. R.; MANNICH, M.; COLOMBO, G. T. Tubo de turbidez para determinação de baixo custo da turbidez em corpos d'água superficiais. *Rega*, v. 14, n. 5, 2017. DOI: <10.21168/rega.v14e5>.

GOMES, P.C.S.; ROCHINHA, I.d.S.P.; PAIVA, M.H.R.d.; SANTIAGO, A.d.F. Performance of Different Macrophytes and Support Media in Constructed Wetlands for High Turbidity Reduction from Mine Spoil Rainwater. Resources 2024, 13, 168. DOI: https://doi.org/10.3390/resources13120168>.

GOMIDE, C. S., COELHO, T. P., TROCATE, C., MILANEZ, B., WANDERLEY, L. J. M., Mineração - Dicionário. 2. *Dicionário de mineração*. GRAVES, R. L.; WOLFE, P. Recent advances in mathematical programming. 1963.

GUPTA, H.V.S.; SOROOSHIAN, S.; YAPO, P.O. Status of automatic calibration for hydrologic models: comparison with multilevel expert calibration. Journal of Hydrologic Engineering, v. 4, n. 2, p. 135-143, 1999.

KADLEC, R. H.; WALLACE, S. Treatment wetlands. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2008.

KASENENE, F. Performance of inclined plates settler integrated with constructed wetland for high turbidity water treatment. *Environmental Science and Pollution Research*, 2023.

LAUTENSCHLAGER, S. R. Modelagem do desempenho de wetlands construídas. São Paulo, 2001.

METCALF and EDDY, Inc. (1991) Wastewater Engineering: Treatment, Disposal, and Reuse. 3rd Edition, McGraw-Hill, Inc., Singapore.

MITSCH, W.J.; GOSSELINK, J.G. (2015) Wetlands. 5th Edition, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken.

MONTGOMERY, D. C.; PECK, E. A.; VINING, G. G. Introduction to linear regression analysis. 3. ed. New York: Wiley-Interscience, 2006.

MORIASI, D. N., ARNOLD, J. G., VAN LIEW, M. W., BINGNER, R. L., HARMEL, R. D., & VEITH, T. L. (2007). Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Transactions of the ASABE*, *50*(3), 885-900.

NASH, J. E.; SUTCLIFFE, J. E. River flow forecasting through conceptual models: Part I. A discussion of principles. *Journal of Hydrology*, v. 10, n. 3, p. 282-290, abr. 1970.

OPITZ, T.; BENÍTEZ, S.; FERNÁNDEZ, C.; OSORES, S.; NAVARRO, J. M.; RODRÍGUEZ-ROMERO, A.; LOHRMANN, K. B.; LARDIES, M. A. Minimal impact at current environmental concentrations of microplastics on energy balance and physiological rates of the giant mussel *Choromytilus chorus*. *Marine Pollution Bulletin*, [S.l.], v. 162, 111834, 2021. ISSN 0025-326X.

POLI, R.; KENNEDY, J.; BLACKWELL, T. Particle swarm optimization. *Swarm Intelligence*, v. 1, p. 33–57, 2007. DOI: <u>https://doi.org/10.1007/s11721-007-0002-0</u>.

QUININO, R. C.; REIS, E. A.; BESSEGATO, L. F. O Coeficiente de Determinação R² como Instrumento Didático para Avaliar a Utilidade de um Modelo de Regressão Linear Múltipla, 2011.

RIBEIRO, T. H.; DE SOUZA, J. B. Controle da drenagem ácida de mina de carvão por meio de wetlands construídos. *Revista AIDIS de Ingeniería y Ciencias Ambientales: Investigación, Desarrollo y Práctica*, v. 15, n. 2, p. 831–847, 2022. DOI: 10.22201/iingen.0718378xe.2022.15.2.79422

ROSEN, J. B. The gradient projection method for nonlinear programming. Part I. Linear constraints. Journal of the society for industrial and applied mathematics, v. 8, n. 1, p. 181-217, 1960.

SACOMAN, M. A. R. Otimização de projetos utilizando GRG, Solver e Excel. In: *Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia (COBENGE)*, 2012.

SHEORAN, A. S.; SHEORAN, V. Heavy metal removal mechanism of acid mine drainage in wetlands: A critical review. *Minerals Engineering*, [S. l.], v. 19, n. 2, p. 105-116, 2006. ISSN 0892-6875. DOI: <u>https://doi.org/10.1016/j.mineng.2005.08.006</u>.

SHELEF, O.; GROSS, A.; RACHMILEVITCH, S. Role of plants in a constructed wetland: current and new perspectives. *Water*, v. 5, n. 2, p. 405-419, 2013.

STEFANATOU, A.; LAGKADAS, M.; PETOUSI, I; SCHIZA, S.; STASINAKIS, A. S.; FYLLAS, N.; FOUNTOULAKIS, M. S. Vertical flow constructed wetlands as green facades and gardens for on-site greywater treatment in buildings: Two-year mesocosm study on removal performance. *Science of The Total Environment*, [S.1.], v. 906, p. 167362, 2024. ISSN 0048-9697. DOI: <u>https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.167362</u>.

TEIXEIRA, L. P.; ANDRADE, E. T. de; SILVA, F. C.; CARMO, D. D. F. do. Wetland construído como alternativa para o tratamento terciário em municípios sem sistema de coleta de esgoto: uma revisão bibliográfica. *Revista Tecnológica da Universidade Santa Úrsula*, v. 4, n. 2, p. 1-23, 2021.

WANG, W.; YANG, J.; HUANG, J.; LI, Z.; SUN, M. Outlier denoising using a novel statisticsbased mask strategy for compressive sensing. *Remote Sensing*, v. 15, p. 447, 2023. DOI: https://doi.org/10.3390/rs15020447.