

DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO DE ABORDAGEM PROBABILÍSTICA PARA ANÁLISE DA QUALIDADE DA ÁGUA

Marianne Bueno dos Passos Brum¹; Fernando Mainardi Fan²

RESUMO: Este artigo investiga uma abordagem estatística ao problema de modelagem de qualidade de água, principalmente em casos de baixa confiabilidade e de alta incerteza, através da modificação de um modelo determinístico para elaboração de um modelo probabilístico. É avaliado um estudo de caso, através do qual são feitas comparações entre os dois modelos, e analisadas vantagens e desvantagens de cada metodologia. Como, devido à dificuldade de obtenção de dados, ou na necessidade de simulações de cenários futuros, a incerteza é um fator importante, conclui-se que este modelo desenvolvido pode ser uma ferramenta útil na tomada de decisões, ao gerar dados que explicitamente tratam as incertezas envolvidas na modelagem.

Palavras-chave: modelagem; qualidade da água; análise probabilística.

DEVELOPMENT OF A PROBABILISTIC APPROACH MODEL TO WATER QUALITY ANALYSIS

ABSTRACT: This article investigates a statistical approach to the problem of water quality modelling, especially in cases of low reliability and elevated level of uncertainty, by modifying a deterministic model. It is evaluated a case study, by which comparisons are made between both models, and are analyzed advantages and disadvantages of both methodologies. Since, due to difficulty in obtaining data or needing to simulate future scenarios, the uncertainty of information is a key factor, it is concluded that the developed model may be a useful tool in decision making, by generating results that explicitly tackle the uncertainties involved in the modelling.

Key-words: modelling; water quality; probabilistic analysis.

INTRODUÇÃO

Como os custos de investimento e manutenção de uma rede extensiva são frequentemente altos, modelos de qualidade de água tem papel importante como ferramentas de apoio ao planejamento, controle e estudo dos recursos hídricos (THE WATER PROJECT, 2017; WHO, 2016). Como a falta de dados precisos gera grandes incertezas nos parâmetros de entrada desses modelos, prejudicando os seus resultados, o emprego de modelos simplificados pode ser mais confiável – a viabilidade de modelos detalhados é limitada pelo acesso a dados de boa credibilidade (VON SPERLING; VAL; NASCIMENTO, 2014). No entanto, a confiabilidade dos resultados é também limitada pela grande variabilidade de valores dos parâmetros e pela insuficiência de dados de calibração e verificação, em modelos simples há erros resultantes da adoção de valores médios como dados de entrada, o que é frequentemente feito devido à facilidade da sua obtenção na literatura. Nestes casos, para a determinação da qualidade da água de um corpo hídrico, não basta a comparação dos dados simulados com os valores limites de legislação, mas também é necessário avaliar a sensibilidade dos resultados aos parâmetros de entrada adotados e realizar uma análise de incertezas (ANA, 2017).

¹Graduanda em Engenharia Civil pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) – Porto Alegre, RS. marianne.brum@ufrgs.br*

²Professor do Instituto de Pesquisas Hidráulicas da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) – Porto Alegre, RS. fernando.fan@ufrgs.br

Deste modo, procurou-se desenvolver um modelo de qualidade de água que leva diretamente em consideração a incerteza dos parâmetros de entrada e gera uma resposta probabilística, através da modificação do modelo QUAL-UFGM (VON SPERLING, 2014), de baixa complexidade e simples operação. A modificação foi feita através da Simulação de Monte Carlo. O objetivo principal do presente trabalho é, portanto, a análise da potencialidade da abordagem probabilística em problemas de estudo de qualidade da água, e também discutir as possíveis vantagens e desvantagens do modelo probabilístico desenvolvido através de comparações com o modelo-base. Ademais, espera-se fornecer subsídios para um melhor aproveitamento de estudos de qualidade de água que usam modelagem.

MATERIAIS E MÉTODOS (DESENVOLVIMENTO DO MODELO)

O modelo de base para o desenvolvimento do modelo probabilístico e análise de resultados probabilísticos foi o modelo QUAL-UFGM, desenvolvido por von Sperling (2014). O modelo está contido em uma planilha eletrônica de fácil manipulação, onde, através do preenchimento dos dados de entrada, obtém-se resultados determinísticos instantâneos para o problema simulado. Sua acessibilidade, versatilidade, baixa necessidade computacional e facilidade de modificação foram fatores decisivos na sua escolha como modelo-base. O modelo de von Sperling permite simular DBO, OD, nitrogênio total e suas frações, fósforo total e suas frações, e coliformes termotolerantes, mas ignora os efeitos de algas e suas inter-relações – esta simplificação é considerada aceitável no caso de rios (VON SPERLING, 2014). Os resultados gerados na planilha incluem valores calculados dos constituintes modelados, porcentagem de atendimento à legislação e gráficos da qualidade da água ao longo do percurso simulado.

O método adotado para a geração de resultados probabilísticos foi a Simulação de Monte Carlo, que consiste na realização de diversas repetições do modelo para geração de dados suficientes para análise estatística, com o objetivo de utilizar a incerteza inerente ao sistema para a sua resolução. Em cada nova modelagem, são gerados novos valores aleatórios para os dados de entrada onde há incerteza, dentro de um intervalo e uma distribuição de probabilidades previamente definidos. No modelo probabilístico desenvolvido, foram adotadas a distribuição uniforme de probabilidade, devido à sua facilidade de implementação computacional; foi deixado livre a faixa de variação de valores, para determinação pelo usuário dos limites adequados para cada caso simulado; e o número de simulações foi fixado em 1000, que, de acordo com a bibliografia, é um número adequado para a maioria dos problemas (COSTA; TEIXEIRA, 2011; MATEUS ET AL., 2015; TONON, 2014; VON SPERLING, 2014).

O modelo foi desenvolvido através de modificação em linguagem VBA da planilha do modelo base QUAL-UFGM, integrando a opção de gerar resultados probabilísticos, sem afetar a possibilidade da utilização do modelo-base. Pela sua concepção, o modelo probabilístico gera as rodadas da Simulação de Monte Carlo e a consequente fabricação de valores brutos, o tratamento estatístico dos resultados obtidos, a criação de gráficos e a produção de relatórios que contém os dados principais. Toda análise da qualidade da água é realizada pelo modelo-base, sem que o modelo probabilístico a altere de forma alguma, de modo que todas as limitações do QUAL-UFGM também são limitações desta ferramenta em estudo. Além disso, todos os parâmetros analisados na planilha original são examinados pelo modelo probabilístico.

No modelo desenvolvido os cálculos estatísticos realizados com os dados resultantes da simulação são a mediana, média, mínimo e máximo. Também são definidas as medianas de cada segmento de rio analisado, e as frequências de atendimento da legislação em um ponto definido pelo usuário em cada simulação. Estes resultados são utilizados para a geração de gráficos de variação da mediana da concentração de parâmetros de qualidade da água, e de porcentagem de atendimento à regulamentação ambiental. O gráfico de mediana representa a mediana de todas as simulações para um dado ponto no rio. Os gráficos de barras informam o atendimento à legislação, seja no trecho inteiro do rio, ou em um ponto específico. Além desses recursos visuais baseados em dados tratados, também são criados gráficos dos dados probabilísticos brutos, que são coloridos de acordo com o atendimento à legislação. Caso o valor crítico do parâmetro não atenda aos valores mínimos ou máximos definidos pela lei, a simulação é pintada de vermelho; caso contrário, é colorida de verde. Ao longo de diversas rodadas, o gráfico se torna um gradiente, de interpretação intuitiva. Devido a limitações computacionais, é gerado um gráfico para cada 250 simulações, ou o usuário pode escolher produzir apenas o primeiro diagrama de gradientes, evitando sobrecarga do processador do computador e agilizando a produção de resultados.

Por fim, foi implementada a possibilidade da geração de um relatório com os principais produtos do modelo: tabelas de resultados estatísticos e gráficos de mediana, atendimento à legislação e gradiente. Os dados brutos de todas as rodadas são salvos em uma nova planilha gerada, possibilitando quaisquer outras análises desejadas, ou mesmo a sua utilização em outros programas para fins diversos.

O modelo probabilístico pode realizar a análise de sensibilidade automaticamente, bem como a calibração do problema, se houver medições suficientes de parâmetros para as verificações. Isto é feito através da Análise de Sensibilidade Regionalizada, de Spear e Hornberger (1980, apud VON SPERLING, 2014), e do método híbrido de von Sperling (VON SPERLING, 2014), utilizando os dados gerados pela própria simulação de Monte Carlo. Como o usuário pode desejar manipular ou visualizar separadamente os dados gerados por estas funcionalidades, elas podem ser acessadas de forma independente através de botões específicos.

APLICAÇÃO E RESULTADOS

Para comparativo entre o modelo base (determinístico) e o modelo desenvolvido (probabilístico) e análise dos resultados possíveis de serem gerados através da ferramenta probabilística, foi utilizado o exemplo apresentado por von Sperling (2014), esquematizado na figura 1. Os parâmetros de qualidade da água foram incluídos no modelo probabilístico da seguinte maneira: o valor adotado pelo modelo determinístico foi considerado como média, sobre a qual foram adicionados intervalos de variabilidade.

A faixa de variação dos coeficientes e parâmetros de entrada foi determinada com base na revisão bibliográfica brasileira do tema (COSTA; TEIXEIRA, 2011; MATEUS et al., 2015; TONON, 2014): ou seja, com exceção do coeficiente de reaeração K_2 , em que foi adotada variabilidade de 50%, e dos parâmetros de esgoto (variação de 20%) todas as outras faixas foram consideradas como 10%. Devido à grande gama de figuras e dados que podem ser gerados, este trabalho delimitou-se a apresentar as figuras do parâmetro OD simulado através de modelagem determinística e probabilística, e expor os resultados tratados para comparação. É apresentado a seguir apenas o gráfico com bandas de incerteza das primeiras 250 simulações, já que todas as rodadas restantes

tiveram resultados semelhantes às iniciais. Para este caso, foi considerado o limite de 5,0mg/L, para rios Classe II. As Figuras 2 e 3 e Tabelas 1 e 2 exibem os resultados de ambas abordagens.

Tabela 1: Resultados do modelo probabilístico para os parâmetros investigados.

Parâmetro	OD (mg/L)	DBO (mg/L)	Fósforo (mg/L)	Coliformes (NMP/100mL)	Nitrito (mg/L)	Nitrato (mg/L)	Amônia (mg/L)
Mínimo	0,00	0,70	0,46	3,23E+04	0,01	0,00	1,75
Máximo	7,85	154,15	2,97	2,18E+07	1,60	2,23	11,68
Mediana	6,59	5,96	1,11	6,11E+05	0,79	0,98	4,15
Média	5,77	16,61	1,19	2,08E+06	0,77	0,85	4,64

Tabela 2: Resultados do modelo-base QUAL-UFGM para os parâmetros investigados.

Parâmetro	OD (mg/L)	DBO (mg/L)	N-amon (mg/L)	N-nitrito (mg/L)	N-nitrato (mg/L)	P (mg/L)	Coli (NMP/100mL)
Mínimo	0,60	1,09	2,25	0,01	0,00	0,60	7,03E+04
Máximo	7,30	107,31	8,50	1,12	1,43	2,20	1,55E+07

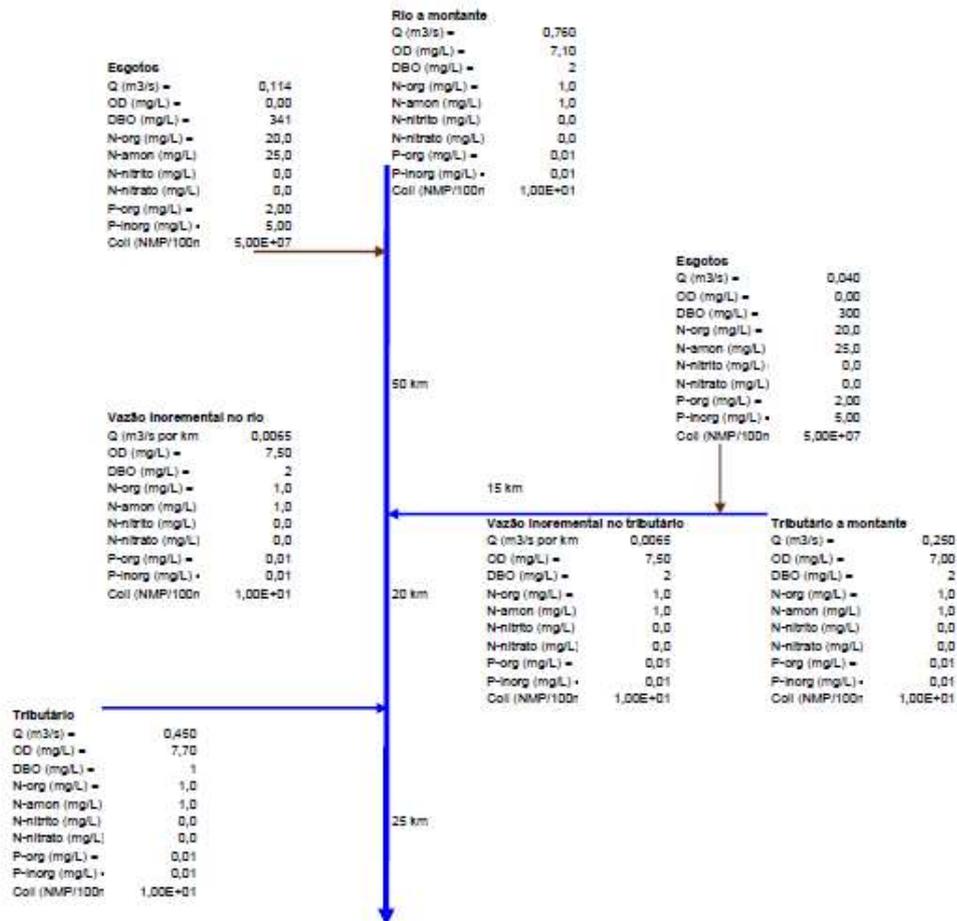
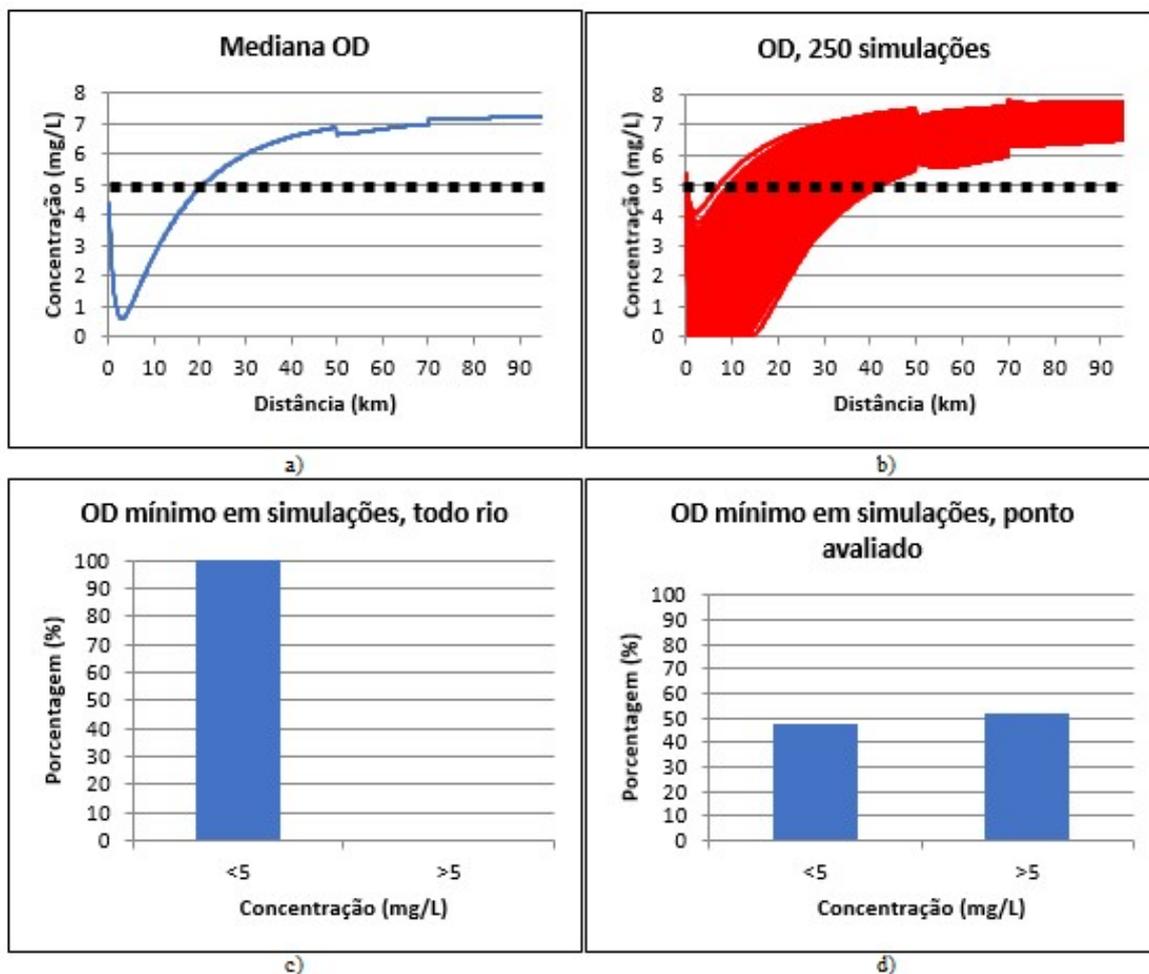


Figura 1: Dados de entrada para o exemplo simulado. Fonte: von Sperling (2014).



Figuras 2. Informações geradas pelo modelo probabilístico: a) Gráfico das medianas das concentrações do parâmetro OD ao longo do rio – a linha pontilhada indica o limite de legislação; b) Gráfico de bandas de incerteza, representa o atendimento ou não do parâmetro OD mínimo em cada simulação – a linha pontilhada indica o limite de legislação; c) Gráfico de barras ao longo do rio, representa o percentual de atendimento ou não do parâmetro OD mínimo em todas simulações; d) Gráfico de barras em um ponto específico, representa o percentual de atendimento ou não do parâmetro OD no ponto específico avaliado (aqui, km 25 do rio) em todas simulações.

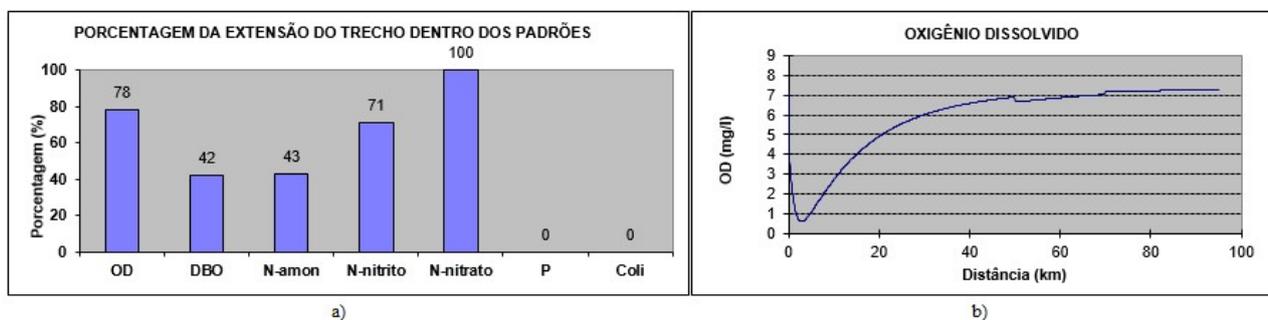


Figura 3. Informações geradas pelo modelo-base QUAL-UFMG padrão: a) Gráfico de barras de atendimento da legislação de todos os parâmetros; b) Gráfico de concentração do parâmetro OD ao longo do rio.

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os resultados dos modelos determinístico e probabilístico são facilmente comparáveis através da análise do gráfico de mediana (Figura 2a), que tem características semelhantes aos gráficos de concentração de poluentes produzidos pelo QUAL-UFGM padrão (Figura 3b), e das Tabelas 1 e 2, que resumem os principais parâmetros estatísticos. Como a diferença entre os resultados de máximos e mínimos gerados pelos dois modelos está condizente com a variabilidade adotada para os dados de entrada, pode-se afirmar que a Simulação de Monte Carlo atingiu estabilidade numérica em 1000 rodadas (EPA, 1997). Também o gráfico da mediana gerado pelo modelo probabilístico apresentou conformação visual ao gráfico de concentração de OD do modelo determinístico.

Dentre as figuras 2a e 3b, nenhuma apresenta a incerteza dos dados de maneira explícita, porém o gráfico de medianas gerado pelo modelo probabilístico é resultante de um tratamento estatístico dos resultados, diferindo das concentrações calculadas pelo QUAL-UFGM, que são diretamente vinculadas aos dados de entrada inseridos. Assim, no modelo probabilístico, a incerteza dos dados é abordada mesmo no caso mais simplificado, representado pela mediana.

Existe uma diferença na abordagem adotada para a apresentação de resultados, devido ao método de avaliação utilizado: enquanto o modelo QUAL-UFGM padrão (Figura 3a) usualmente permite verificar o atendimento aos padrões somente ao longo do curso hídrico, o modelo probabilístico permite averiguar o atendimento de todo o comprimento do rio, comparando o valor crítico de cada simulação com o limite da legislação (Figura 2c), e também permite verificar a conformação dos parâmetros em um ponto de interesse específico (Figura 2d). Esta escolha no desenvolvimento do modelo foi tomada para possibilitar a análise probabilística das situações em estudo. A figura 2c demonstra que, para este exemplo, considerando o pior cenário (valores mínimos de OD) nenhuma das simulações apresentou OD mínimo dentro dos padrões, independentemente que a mediana do parâmetro mostre que, em maior parte do trecho, ele esteja acima do limite definido.

No ponto estudado (km 25) foi avaliada a conformação à legislação do OD, gerando a Figura 2d. Percebe-se com esta figura, que o parâmetro OD atendeu à legislação em aproximadamente 52% das rodadas, e ficou abaixo do permitido em 48% delas. Esta informação é relevante para um gestor de qualidade da água que, ao contrário de usar um valor único e sem entendimento das incertezas, poderia optar por permitir o lançamento do poluente se 50% das rodadas permitirem, ou 70%, ou 90% das rodadas, dependendo da aversão ao risco existente. Este é o grande valor do modelo probabilístico, que é a possibilidade de tomar decisões incluindo a incerteza.

Já no gráfico de mediana, e no gráfico de concentração do parâmetro no modelo QUAL-UFGM padrão, este ponto resultaria em OD de cerca de 6mg/L, aceitável. O gráfico da mediana serve como uma forma de fazer uma decisão de “consenso” sobre a qualidade da água baseada nas múltiplas simulações. Um gestor de qualidade da água poderia usar outra porcentagem como decisão de consenso, se desejado.

O gráfico de bandas de incerteza (Figura 2b) demonstra de forma clara para o usuário que nenhuma das simulações geradas resultou em OD mínimo acima do limite imposto pela legislação ambiental. Novamente, como discutido para a Figura 2c, é importante atentar para o fato de que, mesmo que a Tabela 1 e a Figura 2a mostrem que maior parte do curso hídrico esteve conforme à regulamentação, isto pode não ser suficiente dadas as incertezas nos parâmetros de modelagem.

Caso fosse analisado um maior intervalo de variação nos dados de entrada, mantida a diferente interpretação dos resultados, a mediana ainda teria conformação visual com o gráfico de concentração ao longo do rio do modelo QUAL-UFMG padrão. No entanto, haveria grandes diferenças nos resultados quantitativos, e talvez nos intervalos de atendimento à legislação. A modelagem com pouquíssimos dados de entrada representa situações reais de grande incerteza. Neste artigo, em que se propõe uma análise inicial, limitou-se a menores variações para esclarecimento da diferença entre a abordagem probabilística e determinística.

CONCLUSÃO

A grande vantagem do modelo probabilístico é a sua abordagem estatística às situações em estudo, englobando incertezas e representando-as de forma mais clara para o usuário, como através das figuras adicionais criadas: os gráficos com bandas de incerteza para cada parâmetro de qualidade de água e o gráfico de barras para um ponto específico do rio (Figuras 1b-1d). Com o auxílio dos gráficos de barras, e a tabela de resultados estatísticos, a informação qualitativa do gradiente é complementada de forma quantitativa, melhorando o entendimento do fenômeno de poluição do rio. Ademais, a Figura 2d é bastante interessante para avaliações de qualidade da água em comunidades específicas, como para determinar a potabilidade em uma área específica do rio, ou os efeitos da descarga de esgotos em diferentes posições do curso d'água. Apesar de isso ser possível em análises determinísticas, a abordagem estatística do modelo probabilístico permite um mapeamento mais claro das incertezas.

Crê-se que o método de demonstração dos resultados a partir dos gráficos de barras no modelo probabilístico engloba melhor as incertezas e é mais cientificamente honesto, pois ele permite a incorporação das incertezas nos resultados. A possibilidade de dupla análise (porcentagem de atendimento em todo rio e em um ponto específico) potencializa o modelo, enquanto a alternativa de manipulação dos resultados brutos, que são gerados em planilha adicional, dá maior versatilidade à ferramenta, ao não limitar o usuário às funcionalidades atualmente existentes.

É importante notar, contudo, que o modelo probabilístico apresenta limitações quanto ao uso: ele é restrito pelas simplificações do modelo-base; pelas reduções computacionais necessárias para a acessibilidade e correta funcionalidade do programa; e pelas simplificações estatísticas adotadas para a Simulação de Monte Carlo, de modo a minimizar o número de dados de entrada necessários, diminuir a complexidade do modelo e facilitar a sua programação.

Para novos trabalhos, e para o subsequente desenvolvimento deste mesmo modelo, sugere-se a implementação do gráfico de balanço de OD, com as devidas análises de incerteza, e da criação de um gráfico de área, que analise todos os resultados gerados individualmente, classificando-os de acordo com seu atendimento à legislação. O modelo completo será disponibilizado para download na internet assim que finalizado. Uma versão beta pode ser solicitada aos autores por e-mail.

REFERÊNCIAS

Agência Nacional de Águas. *Portal da Qualidade das Águas*. Disponível em: <<http://portalpnqa.ana.gov.br/default.aspx>>. Acesso em: 14 jan. 2017.

COSTA, Daniel Jadyr Leite; TEIXEIRA, Denilson. Aplicação de Modelo de Autodepuração para Avaliação da Qualidade da Água do Ribeirão do Ouro, Araraquara-SP. *Revista Uniara*, Araraquara, v. 13, n. 1, p.49-62, jul. 2010.

MATEUS, Marcos Vinícius et al. Análise de Incerteza e Modelagem de Qualidade da Água do Rio Uberaba, Minas Gerais. *Revista Brasileira de Ciências Ambientais*, Uberaba, v. 1, n. 37, p.1-15, set. 2015

THE WATER PROJECT. *The Water Project*. Disponível em: <<https://thewaterproject.org>>. Acesso em: 14 jan. 2017.

TONON, Kesse. *Modelagem da qualidade da água utilizando os modelos Streeter-Phelps e QUAL-UFMG na bacia do Rio Lambari - Poços de Caldas - MG*. 2014. 167 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Ambiental, Universidade Federal de Alfenas, Poços de Caldas, 2014

U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. *Guiding Principles for Monte Carlo Analysis*. Washington, DC: EPA, 1997. Disponível em: < <https://www.epa.gov/risk/guiding-principles-monte-carlo-analysis>>. Acesso em 01 mar. 2017.

VON SPERLING, Marcos. *Estudos e modelagem da qualidade da água de rios*. 2. ed. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2014. 592 p. (Princípios do tratamento biológico de águas residuárias, v.7).

WORLD HEALTH ORGANIZATION. *Sanitation Fact Sheet*. 2016. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs392/en/>>. Acesso em: 25 jan. 2017.