# Simulação da qualidade da água do rio Pardo com incorporação de análise de incerteza

Water quality simulation of Pardo river with incorporation of uncertainty analysis

Izadora Santana Bayer Poton<sup>1</sup>, José Antonio Tosta dos Reis<sup>1</sup>\*, Karinnie Nascimento Almeida<sup>1</sup>, Murilo Brazzali Rodrigues<sup>1</sup>, Antônio Sérgio Ferreira Mendonça<sup>1</sup>, Fernando das Graças Braga da Silva<sup>2</sup>

### RESUMO

A principal perspectiva do presente trabalho é a simulação matemática de transformações de oxigênio dissolvido e demanda bioquímica de oxigênio no rio Pardo (Espírito Santo, Brasil), considerando a incorporação de análise de incerteza pelo Método de Monte Carlo. Para a aplicação do Método de Monte Carlo, as variáveis hidrodinâmicas, condições iniciais de gualidade do rio Pardo e efluentes e constantes cinéticas do modelo de qualidade de água foram gerados aleatoriamente com auxílio das distribuições de probabilidade Normal e Uniforme. O emprego de cada distribuição de probabilidade envolveu a realização de mil simulações dos perfis de oxigênio dissolvido e demanda bioquímica de oxigênio. Os resultados das simulações indicaram que, para o curso d'água estudado, as concentrações mínimas de oxigênio dissolvido variaram predominantemente entre 6,0 e 6,5 mg·L<sup>-1</sup>e, em nenhuma das simulações, apresentaram valores inferiores ao padrão de qualidade ambiental. As concentrações de demanda bioquímica de oxigênio, por sua vez, permaneceram acima do padrão de gualidade ambiental na maior porção intermediária do rio Pardo, com valores máximos entre 16,0 e 17,75 mg·L<sup>1</sup>. No entanto o emprego de diferentes distribuições de probabilidade para a geração aleatória de variáveis hidrodinâmicas, constantes cinéticas e concentrações dos parâmetros de qualidade de água não produziu variações consideradas relevantes quando da análise de frequência das concentrações críticas dos parâmetros de gualidade de água simulados.

Palavras-chave: modelagem matemática; método de Monte Carlo; oxigênio dissolvido; demanda bioquímica de oxigênio; rio Pardo.

## ABSTRACT

The main perspective of the present work is the mathematical simulation of dissolved oxygen and biochemical oxygen demand transformations in the Pardo River (Espírito Santo, Brazil), considering the incorporation of uncertainty analysis by the Monte Carlo method. For the Monte Carlo method application, hydrodynamic variables, Pardo River initial quality conditions, and effluents and water quality model kinetic constants were randomly generated with the aid of Normal and Uniform probability distributions. The use of each probability distribution involved performing 1.000 (one thousand) simulations of the dissolved oxygen and biochemical oxygen demand profiles. The simulation results indicated that, for the studied watercourse, the minimum dissolved oxygen concentrations varied predominantly between 6.0 and 6.5 mg.L<sup>1</sup> and, in none of the simulations, did they present lower values to the environmental quality standard. biochemical oxygen demand concentrations, in turn, remained above the maximum environmental quality standard in the Pardo River largest intermediate portion, with maximum values between 16.0 and 17.7 mg.L<sup>1</sup>. The use of different probability distributions for the random generation of hydrodynamic variables, kinetic constants, and water quality concentrations parameters did not produce variations considered relevant when analyzing the frequency of critical concentrations of simulated water quality parameters.

**Keywords:** mathematical modeling; Monte Carlo method; dissolved oxygen; biochemical oxygen demand; Pardo river.

# INTRODUÇÃO

Os modelos matemáticos de qualidade da água constituem ferramentas essenciais para a avaliação do impacto nos ecossistemas aquáticos e na gestão de recursos hídricos em bacias hidrográficas (PANAGOPOULOS; MAKROPOULOS; MIMIKOU, 2012). A seleção de um modelo de simulação adequado requer correspondência com as características físicas do curso de água em estudo, compreensão das suas limitações, confiabilidade dos dados de entrada e análise de incerteza (MENEZES; OLIVEIRA; SALLA, 2016).

#### D

D-

<sup>1</sup>Universidade Federal do Espirito Santo, Departamento de Engenharia Ambiental - Vitória (ES), Brasil.

\*Autor correspondente: jatreis@gmail.com

Recebido: 22/06/2022 - Aceito: 13/03/2023

-

-m

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Universidade Federal de Itajubá, Instituto de Recursos Naturais - Itajubá (MG), Brasil

Conflitos de interesse: os autores declaram não haver conflitos de interesse. Financiamento: nenhum

Para que um modelo matemático de qualidade de água produza respostas satisfatórias, os parâmetros que descrevem o sistema modelado devem ser obtidos de forma apropriada. No entanto existem incertezas nas determinações dos principais fatores que influenciam parâmetros de qualidade em rios. A definição desses fatores de forma confiável é uma tarefa complexa que depende de coleta de dados, de ensaios de laboratório e de medições de campo, que podem ser fontes de imprecisões e incertezas. Como consequência, valores simulados por modelos podem apresentar diferentes graus de incerteza. Adicionalmente, os parâmetros determinados em certo momento podem não ser representativos do processo que ocorre durante um longo período de tempo (SALAS; SHIN, 1999).

Segundo Renard *et al.* (2010), a modelagem hidrológica – incluindo-se aqui a modelagem da qualidade de água – é afetada por quatro fontes de incertezas, sendo elas: (1) incerteza de entrada, como os erros de amostragem e medição nas estimativas de precipitação e vazão da bacia; (2) incerteza de saída, como, por exemplo, os erros de curva de classificação que afetam as estimativas de escoamento; (3) incerteza estrutural, que é decorrente da representação concentrada e simplificada de processos hidrológicos; e (4) incerteza paramétrica, que reflete a incapacidade de especificar valores exatos dos parâmetros do modelo devido ao comprimento finito e incertezas nos dados de calibração, compreensão do processo imperfeito, aproximações do modelo etc.

Diante do conhecimento insuficiente e da aleatoriedade natural, a incerteza se torna uma parte inerente da modelagem de qualidade da água em bacias hidrográficas (BEVEN; BUYTAERT; SMITH, 2012). Nesse contexto, a função da variabilidade, a aleatoriedade e as incertezas associadas ao emprego de modelos matemáticos, o comportamento de dados de entrada e os coeficientes de modelos de qualidade de água podem ser tratados como processos estocásticos, sujeitos à análise de incertezas.

Existem diferentes técnicas para a realização da análise de incerteza e de sensibilidade de modelos. Uma delas é o Método de Monte Carlo, método por meio do qual são consideradas aleatoriamente diferentes variáveis de entrada num intervalo preestabelecido, simulando os valores de saída correspondentes. Segundo Saisana, Saltelli e Tarantola (2005) e Clemen e Reilly (2013), com o Método de Monte Carlo, as incertezas sobre os fatores de entrada podem ser consideradas simultaneamente ou individualmente e as respostas geradas são então analisadas estatisticamente para quantificação das incertezas.

Conforme Von Sperling (2007), a análise de incerteza utilizando como ferramenta o Método de Monte Carlo é simples, robusta e eficaz, permitindo uma análise probabilística dos resultados do modelo, e não uma simples avaliação de valores determinísticos isolados.

Diversos autores usam o Método de Monte Carlo como ferramenta de auxílio para a modelagem da qualidade de corpos d'água, como Pastres e Ciavatta (2005), McIntyre *et al.* (2005), Lindenschmidt, Fleischbein e Baborowski (2007), Mannina e Viviani (2010), Jiang, Nan e Yang (2013), Holguin-Gonzalez *et al.* (2013), Shojaei, Nazif e Kerachian (2015) e Fortunato *et al.* (2020).

O presente trabalho tem como principal objetivo simular, com incorporação da análise de incerteza conduzida por meio do Método de Monte Carlo, o comportamento das concentrações de oxigênio dissolvido (OD) e demanda bioquímica de oxigênio (DBO) no rio Pardo, afluente do rio Itapemirim, principal curso d'água da porção sul do estado do Espírito Santo. Foram objetos da análise de incerteza as vazões dos cursos d'água e efluentes domésticos, o aporte difuso de vazão, as concentrações iniciais de OD e DBO nos cursos d'água e efluentes, a concentração de saturação de OD e as constantes cinéticas que regulam as variações temporais de OD e DBO, parâmetros de qualidade de água mais relevantes para a avaliação da qualidade de água naquelas situações em que predominam a poluição a partir da disposição final de esgotos domésticos – condição da bacia hidrográfica do rio Pardo e a mais usualmente encontrada em países no estágio de desenvolvimento socioeconômico similar ao brasileiro.

## **METODOLOGIA**

#### Área de estudo

O rio Pardo constitui curso d'água objeto de estudo do presente trabalho. A bacia hidrográfica do rio Pardo possui área de 611 km<sup>2</sup> e está inserida na área de drenagem da bacia hidrográfica do rio Itapemirim (Figura 1). Abrange, total ou parcialmente, os municípios de Ibatiba, Irupi, Iúna e Muniz Freire. Em Minas Gerais, abrange apenas parte do município de Lajinha. A nascente do rio Pardo, principal curso d'água da bacia e objeto central de avaliação, está localizada no município de Ibatiba, e o curso d'água principal possui 57,9 quilômetros de extensão até a foz (CALMON *et al.*, 2016).

Três tributários (Ribeirão São José, Rio Pardinho e Ribeirão da Perdição) e dois lançamentos de efluentes diretos referentes aos municípios de Ibatiba e Iúna compõem os aportes pontuais de vazão ao rio Pardo. Não existem estações de tratamento de esgotos em operação nos pontos de disposição final de esgotos na bacia do rio Pardo. O diagrama unifilar do sistema hídrico objeto de estudo, com as localizações das fontes pontuais e afluentes, é apresentado por meio da Figura 2.



Figura 1 - Localização da Bacia Hidrográfica do Rio Pardo.



Figura 2 - Diagrama unifilar da bacia do Rio Pardo.

0

#### Informações hidrológicas e de qualidade de água

Para a modelagem da qualidade da água do rio Pardo, foram consideradas as informações reunidas por Calmon *et al.* (2016), quando da avaliação do emprego de curvas de permanência de qualidade para suporte ao enquadramento do mesmo sistema hídrico. Do referido trabalho, foram obtidas informações referentes a vazão mínima de referência, condições iniciais de qualidade do rio Pardo e seus principais tributários, vazões de efluentes produzidas pelos diferentes núcleos populacionais, concentração de saturação de OD e constantes cinéticas que regulam as variações de OD e DBO no curso d'água. As Tabelas 1 e 2 sumarizam as informações hidrológicas e de qualidade de água iniciais empregadas para a condução do presente trabalho. Os valores reunidos nas referidas tabelas indicam os números que seriam empregados numa simulação determinística da qualidade de água e no entorno dos quais são aleatoriamente gerados os valores empregados na condução da análise de incerteza.

#### Modelagem de qualidade de água

Para a simulação das variações espaciais das concentrações de OD e DBO, foram empregadas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, envolvendo os processos de desoxigenação associada a oxidação da matéria orgânica e reaeração atmosférica. Além dos aportes pontuais dos efluentes associados aos núcleos urbanos da bacia, as simulações de qualidade de água também consideraram o aporte difuso de vazão. As simulações de qualidade de água assumiram o fluxo pistão como modelo hidráulico, e a descrição das concentrações de OD e DBO ocorreu por meio de soluções analíticas das referidas equações diferenciais, reproduzindo-se as representações conceituais e funcionais estabelecidas pelo modelo clássico de Streeter-Phelps.

Tabela 1 - Valores iniciais de vazões e condições de qualidade de água para a áre
de estudo.

Corpo d'água ou afluente	Vazão (m³·s⁻¹)	DBO (mg·L¹)	OD (mg·L¹)
Rio Pardo*	0,5719	2,00	7,68
Ribeirão São José	0,6180	2,30	7,62
Rio Pardinho	0,2629	9,90	6,29
Ribeirão Perdição	0,6540	2,50	7,61
Esgoto bruto do município de Ibatiba	0,0250	400,00	0,00
Esgoto bruto do município de lúna	0,0200	400,00	0,00
Aporte difuso	0,0353	2,00	7,50

Fonte: Calmon et al. (2016).

OD: oxigênio dissolvido; DBO: demanda bioquímica de oxigênio; \*valores associados à seção imediatamente a montante da disposição final dos esgotos da cidade de Ibatiba, estabelecidos com base em informações de qualidade de água registradas na estação fluviométrica Ponte sobre o Córrego Boa Vista (código 57367000).

#### Tabela 2 - Valores iniciais de constantes cinéticas, temperatura e concentração de saturação de oxigênio dissolvido para a área de estudo.

Coeficiente de decomposição (K <sub>d</sub> , 20°C, dia¹)	0,75
Coeficiente de reparação (K <sub>2</sub> , 20°C, dia <sup>1</sup> )	3,52
Temperatura (º)	20,60
Concentração de saturação de OD (mg·L <sup>:</sup> )	8,11

Fonte: Calmon *et al.* (2016). OD: oxigênio dissolvido.

#### Método de Monte Carlo

Para a análise de incerteza das diferentes variáveis e coeficientes associados à simulação matemática das concentrações de OD e DBO, foi empregado o Método de Monte Carlo. A aplicação do método envolve a execução de um elevado número de simulações sendo gerados para cada uma das simulações, diferentes valores para as variáveis de entrada e coeficientes cinéticos do modelo de qualidade de água. A Figura 3 reúne, num fluxograma, as diferentes etapas associadas à análise de incerteza a ser conduzida com emprego do Método de Monte Carlo.

Neste trabalho, os coeficientes e os dados de entrada para cada simulação de qualidade de água foram gerados aleatoriamente segundo as distribuições de probabilidade Normal e Uniforme, considerando-se uma determinada faixa de variação de valores para cada dado de entrada e coeficientes cinéticos.

A geração aleatória dos dados de entrada e coeficientes cinéticos com auxílio da distribuição normal foi conduzida com o auxílio da Equação 1.

$$Valor = Média x (1 + Aleatório . Cv)$$
(1)

Na Equação 1:

Valor: novo valor para o dado de entrada ou coeficiente do modelo, a ser usado em cada simulação;

Aleatório: número real aleatório, compreendido entre 0 e 1, gerado pela distribuição normal;

Cv: coeficiente de variação.



Figura 3 - Etapas para condução da análise de incerteza com auxílio do Método de Monte Carlo. A geração aleatória das constantes cinéticas (variáveis para as quais há maior incerteza) envolveu a adoção de coeficiente de variação de 20%, conforme sugerido por Fortunato *et al.* (2020). Para a geração aleatória dos demais dados de entrada (variáveis hidrodinâmicas e concentrações dos parâmetros de qualidade de água no rio e efluentes) foi considerado coeficiente de variação de 5%, conforme sugerido por Von Sperling (2007).

Para a geração aleatória das variáveis de entrada com emprego da distribuição uniforme, foram empregadas as Equações 2, 3 e 4.

Valor = Valor mínimo + Aleatório . (Valor máximo – Valor mínimo)	(2)
Valor mínimo = Valor médio . (1 – percentual de variação/100)	(3)
Valor máximo = Valor médio . (1 + percentual de variação/100)	(4)

Nas Equações 2, 3 e 4:

Valor: novo valor para o dado de entrada ou coeficiente do modelo, a ser usado em cada simulação;

Valor mínimo: valor mínimo da faixa de valores para cada dado de entrada ou coeficiente do modelo;

Valor máximo: valor máximo da faixa de valores para cada dado de entrada ou coeficiente do modelo;

Aleatório: número aleatório gerado segundo uma distribuição uniforme, com valor variando de 0 a 1;

Valor médio: valor médio dos dados de entrada;

Percentual de variação: percentual de variação em torno da média.

Para a geração aleatória das constantes cinéticas, assumiu-se percentual de variação de 20%, conforme sugerido por Fortunato *et al.* (2020); percentual de variação de 5% foi utilizado para a geração aleatória dos demais dados de entrada, conforme sugerido por Von Sperling (2007).

Para a definição do número de perfis de OD e DBO, empregou-se procedimento sugerido por Donatelli e Konrath (2005). Nessa etapa do trabalho, com auxílio das distribuições Normal e Uniforme, foram gerados histogramas de frequência, as correspondentes distribuições de frequências acumuladas para as concentrações máximas de DBO e concentrações mínimas de OD, considerando-se a produção de 50, 100, 500, 1.000 e 5.000 perfis de concentrações. Assumiu-se como número adequado de perfis aquele a partir do qual não foram observadas alterações relevantes nas distribuições de frequências acumuladas.

Na sequência, a partir dos perfis de concentração, foram produzidos histogramas de frequência para as concentrações máximas de DBO e mínimas de OD, elemento gráfico que permite associar frequência de ocorrência aos valores extremos das variáveis modeladas.

Para a condução das simulações computacionais de qualidade de água, a análise de incerteza com auxílio do Método de Monte Carlo e o tratamento dos resultados produzidos em ambas as atividades, foi empregada a planilha eletrônica Microsoft Excel<sup>®</sup>.

## **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

Na Figura 4, apresenta-se a variação espacial das concentrações médias de OD e DBO no rio Pardo, obtidas a partir dos valores definidos por Calmon *et al.* (2016)



OD: oxigênio dissolvido; DBO: demanda bioquímica de oxigênio; \*\*para cursos d'água Classe 2, os padrões de qualidade de água estabelecidos para OD (concentração mínima) e DBO (concentração máxima) são numericamente iguais, correspondendo à concentração de 5 mg.L<sup>1</sup>.

Figura 4 - Variação espacial das concentrações de OD e DBO no rio Pardo.

para as constantes cinéticas, características hidrodinâmicas e concentrações iniciais de DBO e OD no curso d'água e efluentes. Nas simulações conduzidas pelos referidos autores, a concentração máxima estimada para a DBO foi 17,46 mg·L<sup>-1</sup>, com concentração mínima de OD de 6,24 mg·L<sup>-1</sup>. Ainda que as concentrações de OD atendam ao padrão de qualidade estabelecido para cursos d'água Classe 2 (5 mg·L<sup>-1</sup>), as concentrações de DBO apresentaram valores superiores ao padrão de qualidade (5 mg·L<sup>-1</sup>) entre a seção em que ocorre a disposição final dos esgotos de Ibatiba e o quilômetro 40. É relevante o registro de que a confrontação com os parâmetros fixados para cursos d'água Classe 2 foi conduzida em função do enquadramento estabelecido para o rio Pardo no trecho objeto de simulação.

A modelagem determinística da matemática de qualidade de água é recorrente e encontra diferentes e importantes aplicações nas áreas de saneamento ambiental e gerenciamento de recursos hídricos, como ilustram os trabalhos de Camargo *et al.* (2010), Salla *et al.* (2013), Calmon *et al.* (2016), Silva *et al.* (2017), Oliveira Filho e Lima Neto (2017), Babamiri *et al.* (2021) e Nada *et al.* (2021). Na modelagem determinística, com relação causal rigidamente estabelecida, as diferentes incertezas que eventualmente podem afetar a resposta de um sistema natural não são consideradas. Como contraponto, a simulação matemática de qualidade de água associada ao Método de Monte Carlo – abordagem que envolve expressivo número de simulações – permite o atrelamento de uma probabilidade de ocorrência aos valores máximos ou mínimos de concentração dos parâmetros modelados, condição que usualmente permite avaliações mais abrangentes e consistentes das respostas dos cursos d'água.

A Figura 5 apresenta os histogramas de frequência e as distribuições de frequências acumuladas das concentrações máximas de DBO, apropriadas com base em conjuntos de 50, 100, 500, 1.000 e 5.000 perfis de DBO gerados aleatoriamente com auxílio da distribuição normal. Figuras similares, que produziram resultados semelhantes, foram produzidas a) para as concentrações máximas de DBO apropriadas de perfis estabelecidos com auxílio da distribuição uniforme; e b) para as concentrações mínimas de OD considerando-se os perfis conformados a partir do emprego das distribuições Normal e Uniforme.

Conforme indicam Donatelli e Konrath (2005), a distribuição de frequências acumuladas é fortemente afetada pelo tamanho da amostra da variável objeto de análise. Segundo os referidos autores, ainda que a ampliação do tamanho



Figura 5 - Histogramas de frequência e distribuições de frequências acumuladas para conjunto 50 (A), 100 (B), 500 (C), 1.000 (D) e 5.000 (E) perfis de demanda bioquímica de oxigênio gerados aleatoriamente com auxílio da distribuição normal.

de amostra possa eventualmente produzir aumento nos requisitos sobre o *hardware* usado na simulação e, consequentemente, acréscimo no tempo de processamento, amostras maiores reduzem a intensidade do ruído amostral e produzem estimativas mais confiáveis das variáveis de estado quando da condução da análise de incerteza.

Neste trabalho, não foram observadas variações relevantes na conformação da distribuição de frequências acumuladas para conjunto com mil simulações ou mais, independentemente do parâmetro de qualidade analisado ou distribuição empregada quando da condução da análise de incerteza com auxílio do Método de Monte Carlo. Neste contexto, as discussões subsequentes foram estabelecidas a partir da análise de conjuntos de mil simulações para os parâmetros OD e DBO.

A incorporação da análise de incerteza com auxílio do Método de Monte Carlo envolveu a realização de conjuntos de mil simulações para descrição da variação espacial dos parâmetros OD e DBO. Os conjuntos foram conformados a partir da geração aleatória de constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e concentrações iniciais de DBO e OD nos cursos d'água e efluentes com auxílio das distribuições de probabilidade Normal e Uniforme.

As Figuras 6 e 7 apresentam, respectivamente, diagramas tipo *boxplot* para as concentrações de OD e DBO quando da geração aleatória de parâmetros e variáveis de estado conduzida com auxílio da distribuição normal. As Figuras 8 e 9, por sua vez, apresentam as distribuições de frequência das concentrações mínimas de OD (Figura 8) e máximas de DBO (Figura 9) para o mesmo contexto de simulações.

A partir da simples inspeção das Figuras 6 a 9, são consideradas relevantes as seguintes observações:

 Num conjunto de mil simulações em que a geração aleatória dos referidos parâmetros e variáveis de estado ocorreu com auxílio da distribuição



Figura 6 - Diagramas tipo box plot para as concentrações mínimas e máximas de oxigênio dissolvido considerando-se o emprego da distribuição normal para a geração aleatória de parâmetros e variáveis de estado.



Figura 7 - Diagramas tipo box plot para as concentrações mínimas e máximas de demanda bioquímica de oxigênio considerando-se o emprego da distribuição normal para a geração aleatória de parâmetros e variáveis de estado. normal, as concentrações críticas de OD ao longo do rio Pardo variaram entre 5,40 e 6,70 mg·L<sup>-1</sup>, com concentrações máximas não superando 7,90 mg·L<sup>-1</sup>. As concentrações máximas de DBO, por sua vez, variaram entre 15,70 e 19,40 mg·L<sup>-1</sup>, com concentração mínima no trecho simulado de 2,20 mg·L<sup>-1</sup>;

No conjunto se simulações realizadas, as concentrações mínimas de OD situaram-se mais frequentemente entre 6,00 e 6,50 mg·L<sup>-1</sup> (66,7%), com pequenas probabilidades de que os valores críticos de OD se situem abaixo de 5,5 mg·L<sup>-1</sup> (0,7%) ou acima de 6,50 mg·L<sup>-1</sup> (2,2%). É relevante observar que, em nenhuma das simulações realizadas, o padrão de qualidade estabelecido para OD em cursos d'água Classe 2 (5 mg·L<sup>-1</sup>) deixou de ser atendido;







**Figura 9** - Distribuição de frequência para as concentrações máximas de demanda bioquímica de oxigênio (mg·L<sup>-1</sup>) considerando-se o emprego da distribuição normal para a geração aleatória de parâmetros e variáveis de estado. • No mesmo cenário de geração aleatória de constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e concentrações dos parâmetros de qualidade de água, as concentrações máximas de DBO ao longo do rio Pardo apresentaram-se majoritariamente entre 16,50 e 17,75 mg·L (62,6%). Concentrações máximas de DBO abaixo de 16,50 mg·L<sup>-1</sup> ocorreram em apenas 4,3% das simulações realizadas. Em apenas seis simulações (0,6%), as concentrações máximas de DBO superaram 19,00 mg·L<sup>-1</sup>. Independente do conjunto de variáveis hidrodinâmicas, condições iniciais de qualidade de água e constantes cinéticas, relevante extensão do curso d'água a jusante do município de Ibatiba apresentou, invariavelmente, concentrações de DBO superiores ao padrão de qualidade definido para rios Classe 2 (5 mg·L<sup>-1</sup>).

Num segundo conjunto de mil simulações, a geração aleatória das constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e concentrações iniciais dos parâmetros de qualidade foi conduzida com auxílio da distribuição uniforme. As Figuras 10 e 11, respectivamente, apresentam diagramas tipo *boxplot* para as concentrações de OD e DBO associadas ao referido conjunto de simulações. As Figuras 12 e 13, por sua vez, apresentam as distribuições de frequência das



Figura 10 - Diagramas tipo box plot para as concentrações mínimas e máximas de oxigênio dissolvido considerando-se o emprego da distribuição uniforme para a geração aleatória de parâmetros e variáveis de estado.



Figura 11 - Diagramas tipo box plot para as concentrações mínimas e máximas de demanda bioquímica de oxigênio considerando-se o emprego da distribuição uniforme para a geração aleatória de parâmetros e variáveis de estado. concentrações mínimas de OD (Figura 12) e máximas de DBO (Figura 13) para o mesmo conjunto de simulações.

Quando da geração aleatória dos parâmetros e das variáveis de estado a partir do emprego da distribuição uniforme, os valores críticos de OD ao longo do trecho simulado do rio Pardo variaram entre 5,30 e 6,80 mg·L<sup>-1</sup>, com concentrações máximas não superando 7,90 mg·L<sup>-1</sup>. As concentrações máximas de DBO, por sua vez, ficaram compreendidas entre 15,60 mg·L<sup>-1</sup> e 19,90 mg·L<sup>-1</sup>, com os valores mínimos no trecho simulado nunca abaixo de 2,10 mg·L<sup>-1</sup>.

Da simples inspeção dos histogramas de frequências das concentrações mínimas de OD (Figura 12) e das concentrações máximas de DBO (Figura 13) são relevantes as seguintes observações:



Figura 12 - Distribuição de frequência para a concentração mínima de oxigênio dissolvido (mg-L<sup>-1</sup>) considerando-se o emprego da distribuição uniforme para a geração aleatória das constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e de qualidade de água.



Figura 13 - Distribuição de frequência para a concentração mínima de demanda bioquímica de oxigênio (mg·L<sup>1</sup>) considerando-se o emprego da distribuição uniforme para a geração aleatória das constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e de qualidade de água.

- Para o conjunto se simulações realizadas, as concentrações mínimas de OD situaram-se mais frequentemente entre 6,00 e 6,50 mg·L<sup>-1</sup> (58,6%), com pequenas probabilidades de que os valores críticos de OD se situem abaixo de 5,5 mg·L<sup>-1</sup> (1,2%) ou acima de 6,50 mg·L<sup>-1</sup> (5,1%). Assim como ocorreu quando do emprego da distribuição normal para a geração aleatória das variáveis e parâmetros do modelo de qualidade de água, as concentrações mínimas de OD conservaram-se invariavelmente acima do padrão de qualidade estabelecido para rios Classe 2;
- As concentrações máximas de DBO ao longo do rio Pardo apresentaram-se majoritariamente entre 16,50 e 17,75 mg·L<sup>-1</sup> (53,1%). Concentrações máximas de DBO abaixo de 16,50 mg·L<sup>-1</sup> ocorreram em aproximadamente 10% das simulações realizadas. Já as concentrações máximas de DBO superaram 19,00 mg·L<sup>-1</sup> e foram observadas em 28 das 1.000 simulações realizadas. É relevante observar que o emprego da distribuição uniforme conservou a simulações de concentrações de DBO superiores ao padrão de qualidade ambiental para o trecho do curso d'água à jusante do município de Ibatiba.

A análise de incerteza com auxílio do Método de Monte Carlo constitui abordagem empregada para a calibração de modelos de qualidade de água (PASTRES; CIAVATTA, 2005; LINDENSCHMIDT; FLEISCHBEIN; BABOROWSKI, 2007), para a avaliação dos efeitos de incertezas associadas às condições iniciais dos parâmetros (SHOJAEI; NAZIF; KERACHIAN, 2015; MENEZES; OLIVEIRA; SALLA, 2016; FORTUNATO et al., 2020) ou associadas às constantes cinéticas (SHOJAEI; NAZIF; KERACHIAN, 2015; MENEZES; OLIVEIRA; SALLA, 2016; PAZMIÑO-RODRÍGUEZ; ZAMBRANO-GANCHOZO; COELLO-BURGOS, 2018; FORTUNATO et al., 2020) sobre as simulações de qualidade de água. Quando da simulação das condições de qualidade de água, não é incomum o emprego de uma única distribuição de probabilidade para a geração aleatória dos parâmetros ou constantes cinéticas objetos da análise de incerteza (MENEZES; OLIVEIRA; SALLA, 2016). No presente estudo, diversificado conjunto de variáveis de estado (concentrações iniciais de OD e DBO em rios e efluentes, vazões de rios e efluentes), parâmetros (concentração de saturação de OD e temperatura) e constantes cinéticas que regulam os processos de desoxigenação e reaeração foram conjuntamente considerados quando da condução da análise de incerteza, levada a termo com auxílio de duas distribuições de probabilidade (Normal e Uniforme). Adicionalmente, deve-se observar que, além de valores de vazões e concentrações associadas às descargas pontuais, a análise de incerteza também se estabeleceu sobre os valores de vazões e concentrações associadas aos aportes difusos.

É relevante observar que o emprego de diferentes distribuições de probabilidade para a geração aleatória de constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e concentrações dos parâmetros de qualidade de água não produziu, para o sistema hídrico objeto de análise, variações significativas nas concentrações críticas de OD ou concentrações máximas de DBO. Também os histogramas de frequência associados às concentrações mínimas de OD e máximas de DBO apresentaram conformação similar, com a distribuição das frequências de ocorrência entre as diferentes classes apresentando comportamento semelhante, ainda que com variações ligeiramente mais pronunciadas para os histogramas produzidos a partir do emprego da distribuição normal.

## CONCLUSÕES

No ambiente computacional da planilha eletrônica Microsoft Excel, simulações de qualidade de água utilizando o modelo de Streeter-Phelps com a incorporação da análise de incerteza pelo Método de Monte Carlo puderam ser conduzidas de forma ágil e simples.

Para o rio Pardo, o emprego das distribuições de probabilidade Normal e Uniforme para a geração aleatória de constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e concentrações dos parâmetros de qualidade de água não produziu variações consideradas relevantes para as concentrações mínimas de OD ou concentrações máximas de DBO. As concentrações críticas de OD concentraram-se majoritariamente entre 6,00 e 6,50 mg·L<sup>-1</sup>. As concentrações máximas de DBO, por sua vez, situaram-se entre 16,50 e 17,75 mg·L<sup>-1</sup>. É relevante observar que, nos conjuntos de simulações de qualidade de água conduzidos, o padrão de qualidade de água para OD em cursos d'água Classe 2 foi invariavelmente atendido. As concentrações de DBO, no entanto, superaram o padrão de qualidade ambiental a partir da disposição final do esgoto do município de Ibatiba, independentemente do conjunto de valores assumidos para as variáveis hidrodinâmicas, constantes cinéticas e condições qualidade de curso d'água e efluentes.

Os histogramas de frequência associados às concentrações mínimas de OD e máximas de DBO apresentaram-se similares quando do emprego das distribuições de probabilidade Normal e Uniforme para a geração aleatória de constantes cinéticas, variáveis hidrodinâmicas e concentrações dos parâmetros de qualidade de água. A distribuição das frequências entre as diferentes classes de concentrações apresentou comportamento semelhante, ainda que com variações ligeiramente mais pronunciadas para os histogramas produzidos a partir do emprego da distribuição normal.

## **CONTRIBUIÇÃO DOS AUTORES**

Poton, I. S. B.: Metodologia, Curadoria dos Dados, Software, Investigação e Escrita – Primeira Redação. Reis, J. A. T.: Conceituação, Metodologia, Análise Formal, Investigação, Software, Escrita – Primeira Redação e Escrita – Revisão e Edição. Almeida, K. N.: Metodologia, Investigação, Análise Formal e Escrita – Revisão e Edição. Rodrigues, M. B.: Metodologia, Investigação, Análise Formal e Escrita – Revisão e Edição. Mendonça, A. S. F.: Metodologia, Investigação, Análise Formal e Escrita – Revisão e Edição. Silva, F. G. B.: Metodologia, Investigação, Análise Formal e Escrita – Revisão e Edição.

## REFERÊNCIAS

BABAMIRI, O.; VANAEI, A.; GUO, X.; WU, P.; RICHTER, A.; NG, K.T.W. Numerical simulation of water quality and self-purification in a mountainous river using QUAL2KW. *Journal of Environmental Informatics*, v. 37, n. 1, p.26-35, 2021. https://doi.org/10.3808/jei.202000435

BEVEN, K.; BUYTAERT, W.; SMITH, L. A. On virtual observatories and modelled realities (or why discharge must be treated as a virtual variable). *Hydrological Processes*, v. 26, n. 12, p. 1905-1908, 2012. https://doi.org/10.1002/hyp.9261

-0

CALMON, A. P. S.; SOUZA, J. C. S.; REIS, J. A. T.; MENDONÇA, A. S. F. Uso combinado de curvas de permanência de qualidade e modelagem da autodepuração como ferramenta para suporte ao processo de enquadramento de cursos d'água superficiais. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 21, n. 1, p. 118-133, 2016. https://doi.org/10.21168/rbrh. v21n1.p118-133

CAMARGO, R.D.A.; CALIJURI, M.L.; SANTIAGO, A.D.F.; COUTO, E.D.A.D.; SILVA, M.D.F.M. Water quality prediction using the QUAL2Kw model in a small karstic watershed in Brazil. *Acta Limnologica Brasiliensia*, v. 22, p. 486-498, 2010. https://doi.org/10.4322/actalb.2011.012

CLEMEN, R.T.; REILLY, T. *Makin hard decisions with decision tools.* Mason: Cengage Learning, 2013.

DONATELLI, G.D.; KONRATH, A.C. Simulação de Monte Carlo na avaliação de incertezas de medição. *Revista de Ciência & Tecnologia*, v.13, n. 25/26, p. 5-15, 2005. https://repositorio.furg.br/handle/1/3200

FORTUNATO, T.C.S.; REIS, J.A.T.; MENDONÇA, A.S.F.; SILVA, F.G.B. Nitrogen compounds behavior simulation in rivers with Uncertainty Analysis. *Revista Ambiente e Água*, v. 15, n. 3, p. 1-15, 2020. https://doi.org/10.4136/ambi-agua.2449

HOLGUIN-GONZALEZ, J.E.; EVERAERT, G.; BOETS, P.; GALVIS, A.; GOETHALS, P.L. Development and application of an integrated ecological modelling framework to analyze the impact of wastewater discharges on the ecological water quality of rivers. *Environmental Modelling & Software*, v. 48, p. 27-36, 2013. https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2013.06.004

JIANG, Y.; NAN, Z.; YANG, S. Risk assessment of water quality using Monte Carlo simulation and artificial neural network method. *Journal of Environmental Management*, v. 122, p. 130-136, 2013. https://doi.org/10.1016/j. jenvman.2013.03.015

LINDENSCHMIDT, K.; FLEISCHBEIN, K.; BABOROWSKI, M. Structural uncertainty in a river water quality modelling system. *Ecological Modelling*, v. 204, n. 3-4, p. 289-300, 2007. https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2007.01.004

MANNINA, G.; VIVIANI, G. Water quality modelling for ephemeral rivers: Model development and parameter assessment. *Journal of Hydrology*, v. 393, n. 3-4, p. 186-196, 2010. https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2010.08.015

MCINTYRE, N; JACKSON, B; WADE, A.J; BUTTERFIELD, D; WHEATER, H.S. Sensitivity analysis of a catchment-scale nitrogen model. *Journal of Hydrology*, v. 315, p. 71-92, 2005. https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2005.04.010

MENEZES, J.P.C.; OLIVEIRA, L.F.C.; SALLA, M.R. Incertezas sobre a modelagem matemática de qualidade da água em curso de água urbano. *Ciência & Engenharia*, v. 25, p. 01-08, 2016. https://doi.org/10.14393/198340 71.2016.34404

NADA, A.; ZEIDAN, B.; HASSAN, A.A.; ELSHEMY, M. Water quality modeling and management for Rosetta Branch, the Nile River, Egypt. *Environmental*  Monitoring and Assessment, v. 193, n. 9, p. 1-17, 2021. https://doi.org/10.1007/ s10661-021-09357-8

OLIVEIRA FILHO, A.A.; LIMA NETO, I.E. Modelagem da qualidade da água do rio Poti em Teresina (PI). *Engenharia Sanitária e Ambiental*, v. 23, n.1, p. 3-14, 2017. https://doi.org/10.1590/S1413-41522017142354

PANAGOPOULOS, Y.; MAKROPOULOS, C.; MIMIKOU, M. Decision support for diffuse pollution management. *Environmental Modelling & Software*, v. 30, p. 57-70, 2012. https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2011.11.006

PASTRES, R.; CIAVATTA, S.A Comparison between the uncertainties in model parameters and in forcing functions: its application to a 3D waterquality model. *Environmental Modelling & Software*, v. 20, p. 981-989, 2005. https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2004.09.010

PAZMIŇO-RODRÍGUEZ, J.C.; ZAMBRANO-GANCHOZO, G.L.; COELLO-BURGOS, H.A. Water quality modeling of the Águas Claras stream, canton Quevedo, Ecuador. *Dyna*, v. 85, n. 204, p. 204-214, 2018. https://doi. org/10.15446/dynav85n204.65847

RENARD, B.; KAVETSKI, D.; KUCZERA, G.; THYER, M.; FRANKS, S.W. Understanding predictive uncertainty in hydrologic modeling: The challenge of identifying input and structural errors. *Water Resources Research*, v. 46, n. 5, 2010. https://doi.org/10.1029/2009WR008328

SAISANA, M.; SALTELLI, A.; TARANTOLA, S. Uncertainty and sensitivity analysis techniques as tools for the quality assessment of composite indicators. *Journal of the Royal Statistical Society: Series A (Statistics in Society)*, v. 168, n. 2, p. 307-323, 2005. https://doi.org/10.1111/j.1467-985X.2005.00350.x

SALAS, J.D.; SHIN, H. Uncertainty analysis of reservoir sedimentation. *Journal of Hydrological Engineering*, v. 125, n. 4, p. 339-350, 1999. https://doi. org/10.1061/(ASCE)0733-9429(1999)125:4(339)

SALLA, M.R.; PEREIRA, C.E.; ALAMY FILHO, J.E.; PAULA, L.M.D.; PINHEIRO, A.M. Estudo da autodepuração do Rio Jordão, localizado na bacia hidrográfica do Rio Dourados. *Engenharia Sanitária e Ambiental*, v. 18, n. 2, p. 105-114, 2013. https://doi.org/10.1590/S1413-41522013000200002

SILVA, M.M.A.P.M.; FARIA, S.D.; MOURA, P.M. Modelagem da qualidade da água na bacia hidrográfica do Rio Piracicaba (MG). *Engenharia Sanitária e Ambiental*, v. 22, n., p. 133-143, 2017. https://doi.org/10.1590/S1413-41522017134420

SHOJAEI, M.; NAZIF, S.; KERACHIAN, R. Joint uncertainty analysis in river water quality simulation: a case study of the Karoon River in Iran. *Environmental Earth Sciences*, v. 73, n. 7, p. 3819-3831, 2015. https://doi.org/10.1007/s12665-014-3667-x

VON SPERLING, M. *Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias* - Estudos e Modelagem da Qualidade da Água de Rios. Belo Horizonte: DESA/UFMG, 2007.

