

# USF

## Campus de São Carlos

**IMPLEMENTAÇÃO DA PLATAFORMA "SAAM  
FOR WINDOWS" PARA A MODELAGEM E  
SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE  
POLUENTES EM CURSOS D'ÁGUA**

**ANDRÉA LUIZA DA SILVA**

**ORIENTADOR: Prof.Dr. Marcius Fantozzi Giorgetti**

## UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO



**ESCOLA DE ENGENHARIA  
DE SÃO CARLOS**

Andréa Luiza da Silva

**IMPLEMENTAÇÃO DA PLATAFORMA “SAAM FOR WINDOWS”  
PARA A MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE  
POLUENTES EM CURSOS D’ÁGUA**

Serviço de Pós-Graduação EESC/USP  
**EXEMPLAR REVISADO**  
Data de entrada no Serviço: 10/11/2003.  
Ass.: *Leandro Corradi*

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos, da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do Título de Mestre em Hidráulica e Saneamento.

**ORIENTADOR:** Prof. Dr. Marcius Fantozzi Giorgetti

DEDALUS - Acervo - EESC



31100044212

São Carlos  
2003



✓

|        |           |
|--------|-----------|
| Class. | TESE-EESC |
| Cutt.  | 5524      |
| Inclui | CD-ROM    |
| Tombo  | T312/03   |
| Sysno  | 1349953   |

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento  
da Informação do Serviço de Biblioteca - EESC/USP

S586i Silva, Andréa Luiza da  
Implementação da plataforma "SAAM for Windows" para a modelagem e simulação do transporte de poluentes em cursos d'água / Andréa Luiza da Silva. -- São Carlos, 2003.  
Inclui 1 CD-Rom.

Dissertação (Mestrado) -- Escola de Engenharia de São Carlos-Universidade de São Paulo, 2003.  
Área : Hidráulica e Saneamento.  
Orientador: Prof. Dr. Marcius Fantozzi Giorgetti.

1. Qualidade da água. 2. Poluição. 3. Transporte de poluentes. 4. Modelagem matemática. 5. Modelagem computacional. I. Título.

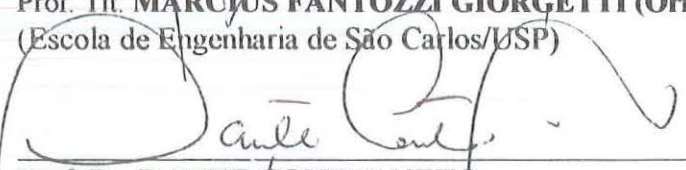
**FOLHA DE JULGAMENTO**

Candidata: Engenheiro **ANDRÉA LUIZA DA SILVA**

Dissertação defendida e julgada em 26-09-2003 perante a Comissão Julgadora:

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Tit. **MARCIUS FANTOZZI GIORGETTI (Orientador)**  
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)


APROVADA

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. **DANTE CONTIN NETO**  
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

Aprovada

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. **ANTENOR RODRIGUES BARBOSA JÚNIOR**  
(Universidade Federal de Ouro Preto/UFOP))

Aprovada

  
\_\_\_\_\_  
Profª. Associada **MARIA DO CARMO CALJURI**  
Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia (Hidráulica e Saneamento) e  
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

Dedico este trabalho aos meus queridos pais que sempre me apoiaram durante toda a trajetória e a minha querida irmã Vivianne.

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Professor Marcius Fantozzi Giorgetti pela orientação, apoio e contribuição para meu crescimento profissional.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq pela bolsa de estudo concedida.

Ao Gui, Katt, Luís Hamilton, Júlia, Ana Paula, Ana Carla, Cibele e Priscila representando as amizades construídas em São Carlos.

E a todos os amigos, colegas e professores que de alguma forma contribuíram para a realização deste estudo.

## RESUMO

SILVA, A. L. (2003). *Implementação da plataforma "SAAM for Windows" para a modelagem e simulação do transporte de poluentes em cursos d'água*. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

Este trabalho teve como objetivo adicionar ao programa computacional SAAM *for Windows* a capacidade de simular o transporte de poluentes em cursos d'água e substituiu com vantagens o modelo computacional QUAL2E para simulações em regime transiente para substâncias conservativas e não conservativas em casos de injeção instantânea. Desta maneira, os pesquisadores dispõem agora de uma ferramenta adicional para simulação de transporte de poluentes em cursos d'água. O SAAM foi desenvolvido originalmente para a simulação de conjuntos discretos, mas neste trabalho, o programa foi adaptado para a simulação de sistemas contínuos. O trabalho de implementação foi feito tomando-se por base a equação unidimensional de transporte de massa por advecção - dispersão adaptada ao processo de simulação do programa SAAM utilizando-se para isto o método de resolução de MacCormack. O SAAM foi implementado também com o recurso de avaliar as concentrações de DBO e OD de maneira simplificada. Foram analisados diversos cenários de transporte de massa através de simulação computacional utilizando o SAAM, o programa QUAL2E e quando possível, soluções analíticas. Os resultados obtidos nestas simulações foram bastante similares, com isso foi possível concluir que a implementação do programa SAAM foi um sucesso.

**PALAVRAS CHAVE:** Qualidade da água, Poluição, Transporte de Poluentes, Modelagem Matemática, Modelagem Computacional.

## ABSTRACT

SILVA, A. L. (2003). *Implementation of "SAAM for Windows" platform for modeling and simulation of the pollutants transport in watercourses*. Dissertation – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

This work had as objective to implement the capacity of simulation of pollutant transport in watercourses to the program *SAAM for Windows* for time-variable simulations for the dispersion of conservative and non-conservative substances from instantaneous sources, as an advantageous alternative to QUAL2E. This way, researchers may have an additional tool for the simulation of pollutant transport in watercourses. SAAM was developed originally for the simulation of discrete systems; the program is now adapted for the simulation of continuous problems. This implementation was made through the use of the advection-dispersion mass transfer equation adapted to SAAM's simulation features, using, for numerical solution, the method of MacCormack. SAAM was also implemented for the evaluation of concentrations of BOD and DO in a simplified way. Several scenarios of mass transport were analyzed through computational simulation using SAAM, the program QUAL2E, and, when possible, analytical solutions. As the results obtained in these simulations were quite similar, it is possible to conclude that the proposed implementation to the program SAAM was successful.

**KEYWORDS:** Water Quality, Pollution, Pollution Transport, Mathematical Modeling, Computational Modeling.



**LISTA DE FIGURAS**

|  |    |
|--|----|
| <b>FIGURA 01</b> - Discretização do rio em Trecho e Elementos Computacionais.  | 6  |
| <b>FIGURA 02</b> - Rede de trechos e elementos computacionais do rio.  | 8  |
| <b>FIGURA 03</b> - Esquema nodal implícito clássico.   | 10 |
| <b>FIGURA 04</b> – Mecanismos interagentes no balanço do oxigênio dissolvido representados no ambiente aquático. (VON SPERLING, 1995)  | 13 |
| <b>FIGURA 05</b> - Descrição gráfica do Método de Runge-Kutta de quarta ordem.   | 15 |
| <b>FIGURA 06</b> - Descrição gráfica do Método de MacCormack   | 17 |
| <b>FIGURA 07</b> – Ilustração dos principais erros numéricos   | 19 |
| <b>FIGURA 08</b> - Representação esquemática do efeito de difusão numérica.  | 20 |
| <b>FIGURA 09</b> - Representação esquemática do rio estudado com a indicação do ponto de descarga e o sentido do escoamento  | 28 |
| <b>FIGURA 10</b> - Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,2 h – Caso 1.  | 29 |
| <b>FIGURA 11</b> - Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,4 h – Caso 1.  | 29 |
| <b>FIGURA 12</b> - Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,6 h. – Caso 1. | 30 |

**FIGURA 13** - Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,8 h – Caso1. 30

**FIGURA 14** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso2. 32

**FIGURA 15** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1,5 h – Caso2. 32

**FIGURA 16** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2 h – Caso2. 33

**FIGURA 17** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2,5 h – Caso2. 33

**FIGURA 18** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,2 h – Caso3. 36

**FIGURA 19** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,4 h – Caso3. 36

**FIGURA 20** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,6 h – Caso3. 37

**FIGURA 21** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso4. 38

**FIGURA 22** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1,5 h – Caso4. 38

**FIGURA 23** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2 h – Caso4. 39

**FIGURA 24** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2,5 h – Caso4. 39

**FIGURA 25** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso5. 40

**FIGURA 26** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1,5 h – Caso5. 41

**FIGURA 27** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2 h – Caso5. 41

**FIGURA 28** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2,5 h – Caso5. 42

**FIGURA 29** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso6. 43

**FIGURA 30** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 3 h – Caso6. 43

**FIGURA 31** – Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 5 h – Caso6. 44

**FIGURA 32-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,2 h – Caso7. 45

**FIGURA 33-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,2 h – Caso7. 46

**FIGURA 34-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,4 h – Caso7. 46

**FIGURA 35-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,4 h – Caso7. 46

**FIGURA 36-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,6 h – Caso7. 47

**FIGURA 37-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,6 h – Caso7. 47

**FIGURA 38-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 120 s – Caso8. 49

**FIGURA 39-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 120 s – Caso8. 49

**FIGURA 40-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 360 s – Caso8. 50

**FIGURA 41-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 360 s – Caso8. 50

**FIGURA 42-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 480 s – Caso8. 51

**FIGURA 43-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 480 s – Caso8. 51

**LISTA DE SIGLAS**

**CNPq** Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

**EESC** Escola de Engenharia de São Carlos

**NCASI** Conselho Nacional para a Melhoria do Ar e dos Rios (dos Estados Unidos da América)

**SAAM** Programa Computacional para as áreas de Saneamento e Ambiental

**USEPA** Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos da América

**USP** Universidade de São Paulo

## LISTA DE SÍMBOLOS

|                         |   |
|-------------------------|---|
| A                       | área da seção transversal de um elemento computacional genérico ( $L^2$ ) |
| $A_L$                   | concentração da biomassa de algas ( $M \cdot A_L / L^3$ )                 |
| B                       | largura média do canal ou rio (L)   |
| C                       | concentração de um constituinte genérico ( $M/L^3$ )                      |
| $C_{i-1}, C_i, C_{i+1}$ | concentração dos constituintes avaliados nas posições $i-1$ , $i$ e $i+1$ |
| $C_r$                   | número de <i>Courant</i>  |
| $C_S$                   | concentração de saturação de OD ( $M/L^3$ )                               |
| d                       | profundidade média do curso d'água (L)                                    |
| DBO                     | Demanda Bioquímica de Oxigênio  |
| $D_L$                   | coeficiente de dispersão longitudinal ( $L^2/T$ )                         |
| $D_n$                   | coeficiente de dispersão numérica ( $L^2/T$ )                             |
| h                       | intervalo de tempo para o método de Runge Kutta (T)                       |
| H                       | profundidade (altura da coluna d'água) de um canal ou rio (L)             |
| k                       | constante de decaimento ( $T^{-1}$ )                                      |
| $k_1$                   | coeficiente de desoxigenação ou de decaimento da DBO ( $T^{-1}$ )         |
| $k_2$                   | coeficiente de reaeração ( $T^{-1}$ )                                     |
| $k_3$                   | coeficiente de sedimentação da DBO ( $T^{-1}$ )                           |
| $k_4$                   | coeficiente de demanda bentônica ( $M/L^2 \cdot T$ )                      |
| L                       | concentração da DBO (carbonácea final) ( $M/L^3$ )                        |
| M                       | massa de constituinte (M)   |
| $N_1$                   | concentração de amônia ( $M \cdot N / L^3$ )                              |
| $N_2$                   | concentração de nitrito ( $M \cdot N / L^3$ )                             |
| OD                      | Oxigênio Dissolvido   |
| Pe                      | número de Peclet  |
| pi                      | fontes e sumidouros internos do constituinte                              |
| Q                       | vazão ( $L^3/T$ )   |
| R                       | termo de reações físicas, químicas e biológicas                           |
| ri                      | taxa de decaimento de primeira ordem ( $T^{-1}$ )                         |
| t                       | instante de tempo (T)   |
| U                       | velocidade média (L/T)  |
| x                       | posição no espaço (L)   |

|               |   |
|---------------|---|
| $x_1$         | posição de injeção de constituinte (L)  |
| $\alpha$      | constante usada para a definição de esquema de discretização                                    |
| $\alpha_3$    | taxa de produção de oxigênio (fotossíntese) por unidade de biomassa de algas (M -O/ M - $A_L$ ) |
| $\alpha_4$    | taxa de consumo de oxigênio (respiração) por unidade de biomassa de algas (M - O/ M - $A_L$ )   |
| $\alpha_5$    | taxa de consumo de oxigênio (oxidação) por unidade de concentração de amônia (M-O/M-N)          |
| $\alpha_6$    | taxa de consumo de oxigênio (oxidação) por unidade de concentração de nitrito (M-O/M-N)         |
| $\beta$       | constante usada para a definição de esquema de discretização                                    |
| $\beta_1$     | coeficiente da taxa de oxidação de amônia ( $T^{-1}$ )  |
| $\beta_2$     | coeficiente da taxa de oxidação de nitrito ( $T^{-1}$ )   |
| $\Delta t$    | incremento de tempo (T)   |
| $\Delta x$    | incremento de espaço (L)  |
| $\phi$        | inclinação estimada (j ou formalmente chamado de incremento da função)                          |
| $\mu$         | coeficiente da taxa de crescimento de algas ( $T^{-1}$ )  |
| $\rho$        | coeficiente da taxa de respiração de algas ( $T^{-1}$ )   |
| $\frac{S}{V}$ | fontes externas e/ou sumidouros   |



## SUMÁRIO

|  |    |
|--|----|
| RESUMO .....   | i  |
| <i>ABSTRACT</i> .....  | ii |
| 1- INTRODUÇÃO.....   | 1  |
| 1.1- Generalidades .....   | 1  |
| 1.2- Apresentação dos softwares .....                              | 2  |
| 1.2.1- SAAM <i>for Windows</i> .....                               | 2  |
| 1.2.2- QUAL2E .....  | 2  |
| 1.3- Objetivos .....   | 3  |
| 2- REVISÃO DA LITERATURA.....                                      | 4  |
| 2.1- Os recursos hídricos.....                                     | 4  |
| 2.2- O modelo de qualidade de água QUAL2E.....                     | 4  |
| 2.2.1- Equação do transporte de massa .....                        | 9  |
| 2.2.2- Métodos de Resolução da Equação do Transporte de Massa..... | 13 |
| 2.2.2.1- Métodos de Runge-Kutta.....                               | 14 |
| 2.2.2.2- Método de MacCormack .....                                | 16 |
| 2.2.3- Erros numéricos .....                                       | 18 |
| 3- METODOLOGIA.....  | 24 |
| 4-RESULTADOS E DISCUSSÃO.....                                      | 26 |
| 4.1- Primeira fase .....   | 26 |
| 4.2- Segunda fase.....   | 34 |
| 5- CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....                                     | 52 |
| 5.1- Conclusões.....   | 52 |
| 5.2- Sugestões.....  | 54 |

|                                 |    |
|---------------------------------|----|
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... | 55 |
| APÊNDICES .....                 | 57 |

## 1- INTRODUÇÃO

---

### 1.1- GENERALIDADES

A água, que constitui 70% do organismo humano apresenta propriedades químicas, físicas e físico-químicas importantes. É consumida pelo homem para a manutenção de seus processos biológicos, como a regulação da temperatura corporal e atividades celulares. É, também, o meio onde diversos seres vivos se desenvolvem direta e indiretamente. Além de ser usada para a geração de energia, para fins de irrigação, abastecimento doméstico e industrial, navegação e etc., ela constitui-se, ainda, como meio receptor utilizado pelo homem para a diluição dos resíduos domésticos e industriais.

Devido à explosão demográfica aumentou-se o consumo de água em todos segmentos do seu uso, daí a necessidade de um maior controle para a racionalização e preservação desta. Para que a utilização da água como fonte receptora de dejetos não conflite com os demais usos, exige-se uma gestão criteriosa, com constantes avaliações da sua qualidade. No processo de gerenciamento, para um efetivo controle desta qualidade, devem ser coordenados esforços com uma atuação voltada para a minimização dos efeitos causados pela ação de fontes poluidoras. Para isso, há a necessidade de tomada de decisões que, muitas vezes, se apóiam em modelos de qualidade que, por sua vez, expressam as complexas interações ocorridas dentro do corpo d'água receptor, observando o atendimento de padrões de qualidade fixados. (SILVA, 1999).

## 1.2- APRESENTAÇÃO DOS SOFTWARES

### 1.2.1- SAAM *for Windows*

O programa computacional ou plataforma “SAAM for Windows” (SANitária e AMBIental) foi desenvolvido pelo Engenheiro José Eduardo Matheus Évora como tema de mestrado em 1999. Este programa simula processos de engenharia sanitária e ambiental em sistemas discretos em regime não permanente.

O SAAM resolve sistemas constituídos por blocos (como em um diagrama de blocos para programas de computação – fluxogramas) que representam etapas de um processo inspirado na metodologia desenvolvida por Franks (1972). Cada bloco representa uma operação, e o usuário pode usar blocos pré-existentes ou criar novos. No diagrama de blocos, podem se interligar diferentes operações dependentes entre si para se obter os resultados das variáveis de interesse, desde que o número de equações independentes ou fontes de informação seja igual ao número das incógnitas.

### 1.2.2- QUAL2E

O QUAL2E, The Enhanced Stream Water Quality Model, é um modelo de qualidade de água de rios capaz de simular até quinze constituintes (poluentes, contaminantes, traçadores ou substâncias naturais) em várias combinações, a critério do usuário. Este programa computacional foi criado pela Agência Norte-Americana de Meio Ambiente (U. S. Environmental Protection Agency – EPA) em parceria com o *National Council for Air and Stream Improvement (NCASI)* e o *Department of Civil Engineering at Tufts University*. Com a utilização deste programa é possível avaliar a capacidade de autodepuração de um curso d’água qualquer, assim como, simular o transporte e a cinética de reações de qualquer um dos quinze constituintes previstos. O modelo é aplicável a sistemas ramificados de cursos d’água. Exige a consideração de condições unidimensionais, introduzidas por admitir-se a hipótese da mistura lateral e vertical completa. Isto é, os principais mecanismos de transporte, advecção e dispersão, são significativos somente na direção principal do escoamento, ao longo do eixo do

canal. O QUAL2E utiliza a solução por diferenças finitas para a equação unidimensional de transporte de massa por advecção-dispersão (BROWN, 1987).

O programa QUAL2E pode ser operado em duas modalidades, com respostas para simulações em regime permanente e em regime transiente. Para a primeira modalidade, o programa pode ser usado para se avaliar o impacto na qualidade das águas do corpo receptor devido a descargas contínuas (ou instantâneas) pontuais de efluentes líquidos (magnitude, qualidade e localização), bem como, conjuntamente com um programa de monitoramento da qualidade para identificar a magnitude de fontes não pontuais de descarga (fontes distribuídas). A segunda modalidade, permite que o usuário faça a simulação dos efeitos da variação diurna dos dados meteorológicos na qualidade das águas, principalmente para a avaliação do oxigênio dissolvido e temperatura devido à respiração e crescimento das algas (LIMA,1997).

### **1.3- OBJETIVOS**

O presente trabalho tem como objetivos específicos:

- adicionar ao programa SAAM for Windows a capacidade de simular o transporte de poluentes;
- comparar os métodos de simulação do programa SAAM e o programa QUAL2E;
- avaliar a viabilidade de utilização do programa SAAM for Windows em estudos de qualidade de água;
- atuar no programa-fonte do SAAM com o objetivo de automatizá-lo;
- avaliar os problemas e dificuldades encontradas no desenvolvimento do trabalho e indicar soluções.

## 2- REVISÃO DA LITERATURA

---

### 2.1- OS RECURSOS HÍDRICOS

A água é um bem natural e essencial aos seres vivos e a quase todas as atividades humanas. Este bem se presta a usos múltiplos, sendo assim é compreensível que a água requeira características qualitativas aos fins aos quais se destina.

A gestão criteriosa dos recursos hídricos, muitas vezes se apóia no uso de modelos matemáticos de qualidade de água que procuram descrever as interações físicas, químicas e biológicas dentro deste corpo receptor de dejetos, devido à falta de recursos financeiros para se fazer um monitoramento ambiental (estudos de campo).

O presente trabalho tomou por base, em princípio, o modelo matemático de qualidade de água adotado pelo programa computacional QUAL2E.

### 2.2- O MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA QUAL2E

Como citado anteriormente o modelo de qualidade de água adotado pelo QUAL2E permite simular até quinze constituintes em variadas combinações de acordo com o critério adotado pelo usuário. São eles:

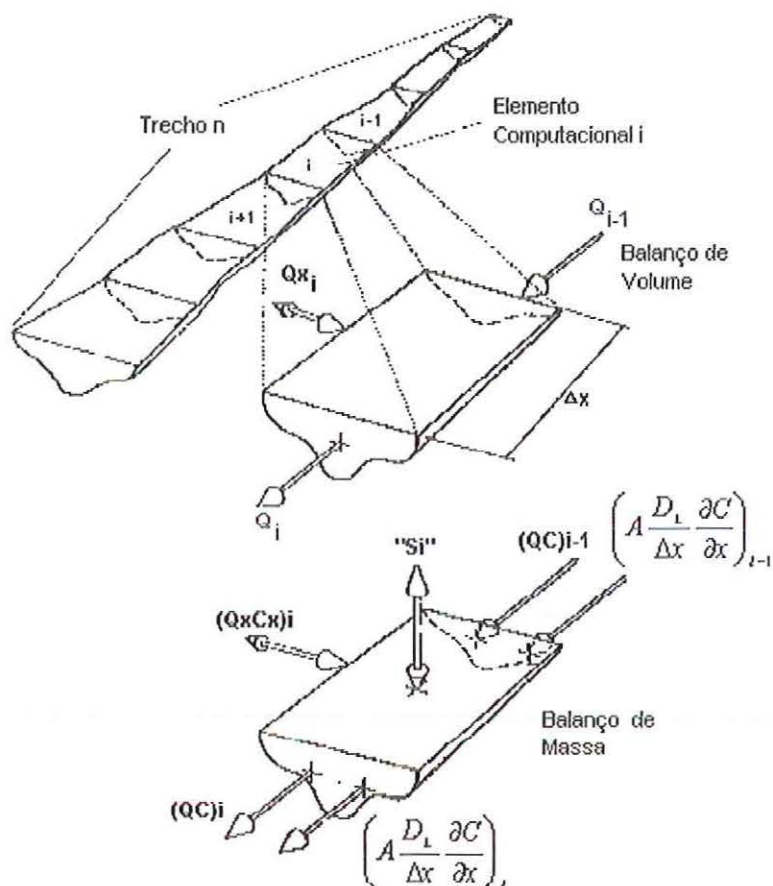
- Oxigênio dissolvido (OD);
- Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO);
- Temperatura;
- Alga como clorofila *a*;
- Nitrogênio Orgânico;
- Amônia;
- Nitrito;
- Nitrato;

- Fósforo Orgânico;
- Fósforo dissolvido;
- Coliformes;
- Constituinte não Conservativo Arbitrário;
- Três Constituintes Conservativos.

O QUAL2E permite considerar pontos múltiplos de descargas dos resíduos e variação espacial da vazão do curso d'água, decorrente de contribuições dos afluentes, de tomadas d'água, da contribuição superficial e/ou subterrânea. Além disso, pode-se estimar a quantidade de água de diluição que seria necessária para se alcançarem níveis pré-determinados de oxigênio dissolvido.

O programa QUAL2E realiza as simulações dos constituintes a partir de elementos computacionais. Estes elementos computacionais representam subdivisões dos trechos do curso d'água a ser estudado como mostrado na fig.(01). Cada trecho deve ter característica hidráulica uniforme e deve ser também dividido em elementos computacionais de igual comprimento, de modo que todos os trechos tenham um número inteiro de elementos computacionais. Para cada elemento é aplicado um balanço hídrico, em termos da vazão; um balanço de energia térmica, em termos da temperatura, e um balanço de massa para o constituinte, quantificado pela sua concentração como na fig.(01). Os processos de advecção e dispersão são considerados neste último balanço.

O motivo de se dividir o curso d'água estudado em trechos é que o QUAL2E admite que os vinte e seis parâmetros de entrada, de natureza física, química ou biológica, são constantes dentro de um mesmo trecho. Apenas a variável de estado pode sofrer variação dentro do mesmo trecho, isto é, a concentração do parâmetro estudado (OD, por exemplo) é calculada para cada elemento computacional para se obter a variação dentro do trecho.



**FIGURA 01-** Discretização do rio em Trecho e Elementos Computacionais. Balanço de volume e massa para elemento computacional. (BROWN & BARNWELL Jr., 1987).

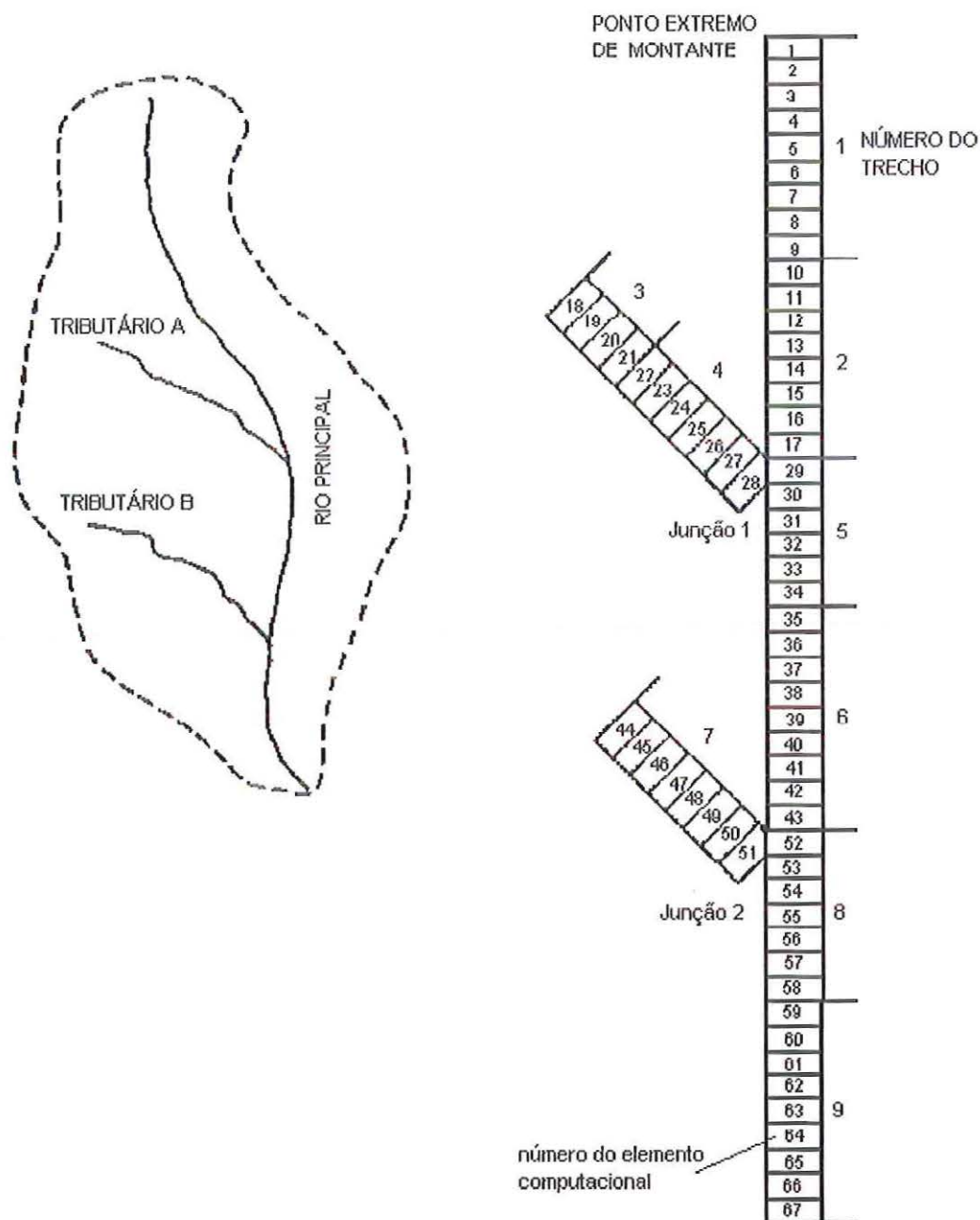
No QUAL2E deve ser determinada a natureza dos elementos computacionais, de acordo com a seguinte classificação:

- 1) Elemento de Cabeceira do Curso d'Água, H (headwater);
- 2) Elemento Padrão, S (Standard);
- 3) Elemento Imediatamente a Montante de uma Junção, U (Just Upstream form a Junction);
- 4) Elemento de Junção, J (Junction);
- 5) Último Elemento do Sistema, E (Last Element in the system);
- 6) Elemento de Entrada ou Fonte Pontual, P (Input Element);
- 7) Elemento de Retirada ou Tomada d'Água, W (Withdrawal);
- 8) Elemento de Barragem, D (Dam).

(Desta forma toda a situação real do curso d'água é informada ao programa, como mostrado na fig.(02).)



Os elementos de cabeceira (1) iniciam tanto os tributários quanto o rio principal, ou seja, será sempre o primeiro elemento no trecho que contém a cabeceira. O elemento padrão (2) é aquele em que não existe nenhuma outra situação especial que deva ser especificada, ou seja, difere dos demais tipos. O elemento tipo 3 é usado para informar o elemento computacional do rio principal situado imediatamente a montante de uma junção. O elemento de junção (4) é aquele que recebe a contribuição de um tributário simulado. O elemento tipo 5 é o último elemento computacional no sistema hídrico, isto é, o contorno de jusante. O elemento tipo 6 representa o elemento computacional receptor de descargas de resíduos e de tributários não simulados e, o elemento 7 corresponde ao elemento no qual é feita uma tomada d'água. O elemento tipo 8 corresponde a uma represa, ou seja, é usado para se indicar a possível presença de acumulação nos contribuintes simulados e/ou no rio principal.



**FIGURA 02-** Rede de trechos e elementos computacionais do rio.  
(BROWN & BARNWELL Jr., 1987)

O programa QUAL2E, desenvolvido em linguagem Fortran, possui algumas limitações impostas durante seu desenvolvimento:

- Número máximo de trechos: 50;
- Elementos Computacionais: não mais que 20 por trecho, ou um total de 500;
- Cabeceiras: máximo de 10;
- Elementos de junção: máximo de 9;

- Descargas e Tomadas d'Água: no máximo 50 elementos.

Estes limites podem ser modificados se o usuário atuar no programa-fonte (original) do QUAL2E.

### 2.2.1- EQUAÇÃO DO TRANSPORTE DE MASSA

A equação unidimensional clássica de transporte de massa por advecção-dispersão incluindo o efeito de decaimento de reação de primeira ordem, tem a forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial \left( A.D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{A.\partial x} - \frac{\partial(A.UC)}{A.\partial x} - kC \quad (01)$$

A equação básica resolvida pelo QUAL2E é uma equação unidimensional de transporte de massa por advecção-dispersão, que é integrada numericamente no tempo e no espaço para cada constituinte. Esta equação inclui os efeitos de advecção, dispersão, diluição, reações e interações dos constituintes, fontes e sumidouros. Para qualquer constituinte, C, a equação pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial \left( A.D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{A.\partial x} - \frac{\partial(A.UC)}{A.\partial x} + R + \frac{S}{V} \quad (02)$$

cada um dos termos do lado direito da equação representa:

$$\frac{\partial \left( A.D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{A.\partial x} - \text{dispersão};$$

$$\frac{\partial(A.UC)}{A.\partial x} - \text{advecção};$$

R - reações de natureza física, química e biológica do constituinte e interações que podem ocorrer no escoamento (este termo R substitui o termo  $\frac{dC}{dt}$  encontrado no manual do QUAL2E de Brown & Barnwell Jr.(1987) para que não haja interpretação equivocada como um termo de derivação ordinária);

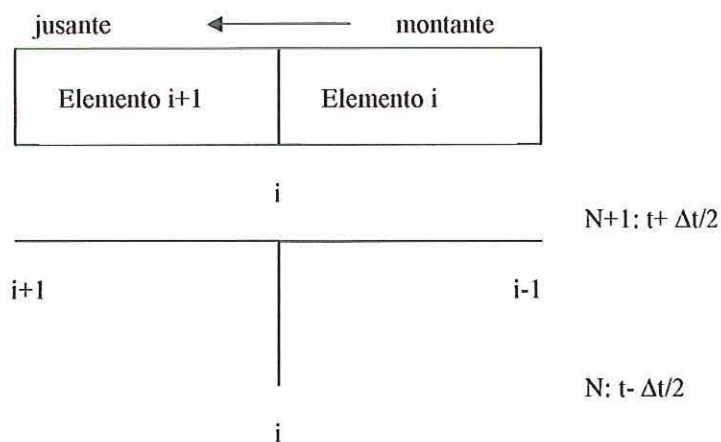
$$\frac{S}{V} - \text{fontes externas e/ou sumidouros.}$$

O termo R representa transformações do constituinte, como crescimento e decaimento, e não deve ser confundido com o termo  $\partial C/\partial t$ , que é a taxa de variação

temporal local da concentração. Em condições de regime permanente a derivada parcial torna-se  $\partial C/\partial t = 0$ .

A eq.(02) não tem solução analítica para a maioria das situações de interesse. Por isso, muitas vezes ela é resolvida numericamente. No QUAL2E utiliza-se o método clássico de diferenças finitas (regressivo). A base geral do esquema de diferenças finitas consiste em encontrar o valor da variável (concentração do constituinte) em função da coordenada espacial num instante de tempo  $n+1$ , quando sua distribuição espacial é conhecida no instante de tempo  $n$ . O instante de tempo zero corresponde à condição inicial. O método das diferenças finitas regressivo, ou esquema implícito, é caracterizado pelo fato de que todas as derivadas espaciais,  $\partial / \partial x$ , são aproximadas à forma de diferenças  $(\Delta / \Delta x)$  no instante de tempo  $n+1$ .

O esquema de diferenças finitas é formulado a partir da consideração da concentração do constituinte  $C$ , em três pontos, conforme o esquema mnemônico representado na fig.(03) a seguir:



**FIGURA 03-** Esquema nodal implícito clássico. (BROWN & BARNWELL Jr., 1987).

São necessários três pontos no instante de tempo  $n+1$  para, numa aproximação, obterem-se as derivadas espaciais. O termo de derivada no tempo é obtido no passo espacial  $i$ .

A eq.(03) pode ser escrita na forma de diferenças finitas em dois passos. Inicialmente, os termos de advecção e difusão são derivados uma vez com relação à  $x$ , que produz:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\left(AD_L \frac{\partial C}{\partial x}\right)_i - \left(AD_L \frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i-1}}{V_i} - \frac{(AuC)_i - (AuC)_{i-1}}{V_i} + R + \frac{S_i}{V_i} \quad (03)$$

donde

$$V_i = A_i \Delta x_i$$

Em seguida, expressam-se, na forma de diferenças finitas, as derivadas espaciais dos termos de difusão e a derivada temporal de C, resultando:

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = & \left( \frac{[(AD_L)_i]C_{i+1}^{n+1} - [(AD_L)_i]C_i^{n+1}}{V_i \Delta x_i} - \frac{[(AD_L)_{i-1}]C_i^{n+1} - [(AD_L)_{i-1}]C_{i-1}^{n+1}}{V_i \Delta x_i} \right) - \\ & - \left( \frac{Q_i C_i^{n+1} - Q_{i-1} C_{i-1}^{n+1}}{V_i} \right) + r_i C_i^{n+1} + p_i + \frac{S_i}{V_i} \end{aligned} \quad (04)$$

Na eq.(04), o termo R foi expresso como:

$$R = r_i C_i^{n+1} + p_i$$

sendo

ri – taxa de decaimento de primeira ordem

pi – fontes e sumidouros internos do constituinte (por exemplo, perdas de nutriente para o crescimento de algas, fontes bentônicas, etc.)

O esquema implícito de diferenças finitas empregado pelo QUAL2E é incondicionalmente estável, isto é, não apresenta instabilidade numérica.

A forma de resolução do QUAL2E se baseia em rearranjar eq.(04) na forma de equações lineares que são então colocadas na forma de uma matriz tridiagonal. Este método é eficiente e leva prontamente a solução.

Quando se pretende fazer a análise de um constituinte específico, como por exemplo, o oxigênio dissolvido (um dos principais índices de qualidade de água), o termo R é substituído por uma equação que representa o balanço de massa do oxigênio dissolvido no processo de autodepuração de um corpo d'água. Esta equação, assim como as demais, (demanda bioquímica de oxigênio, nitrogênio-orgânico, coliformes, etc) são bastante conhecidas e estão apresentadas na literatura. Será apresentada aqui

somente a equação diferencial do oxigênio dissolvido a título de exemplo, para não tornar o texto muito extenso.

Equação diferencial de oxigênio dissolvido:

$$\frac{dC}{dt} = k_2(C_s - C) + (\alpha_3\mu - \alpha_4\rho)A_L - k_1L - \frac{k_4}{d} - \alpha_5\beta_1N_1 - \alpha_6\beta_2N_2 \quad (05)$$

sendo

$k_2$  - coeficiente de reaeração ( $\text{dia}^{-1}$ )

$C_s$  - concentração de saturação de oxigênio dissolvido, nas condições de pressão e temperatura locais (mg/l)

$C$  - concentração do oxigênio dissolvido (mg/l)

$\alpha_3$  - taxa de produção de oxigênio (fotossíntese) por unidade de biomassa de algas (mg-O/mg-  $A_L$ )

$\mu$  - coeficiente da taxa de crescimento de algas ( $\text{dia}^{-1}$ )

$\alpha_4$  - taxa de consumo de oxigênio (respiração) por unidade de biomassa de algas (mg-O/mg-  $A_L$ )

$\rho$  - coeficiente da taxa de respiração de algas ( $\text{dia}^{-1}$ )

$A_L$  - concentração da biomassa de algas (mg-  $A_L$  /l)

$k_1$  - coeficiente de desoxigenação ou de decaimento da DBO ( $\text{dia}^{-1}$ )

$L$  - concentração da DBO (carbonácea final) (mg/l)

$k_4$  - coeficiente de demanda bentônica ( $\text{g/m}^2.\text{dia}$ )

$d$  - profundidade média do curso d'água (m)

$\alpha_5$  - taxa de consumo de oxigênio (oxidação) por unidade de concentração de amônia (mg-O/mg-N)

$\beta_1$  - coeficiente da taxa de oxidação de amônia ( $\text{dia}^{-1}$ )

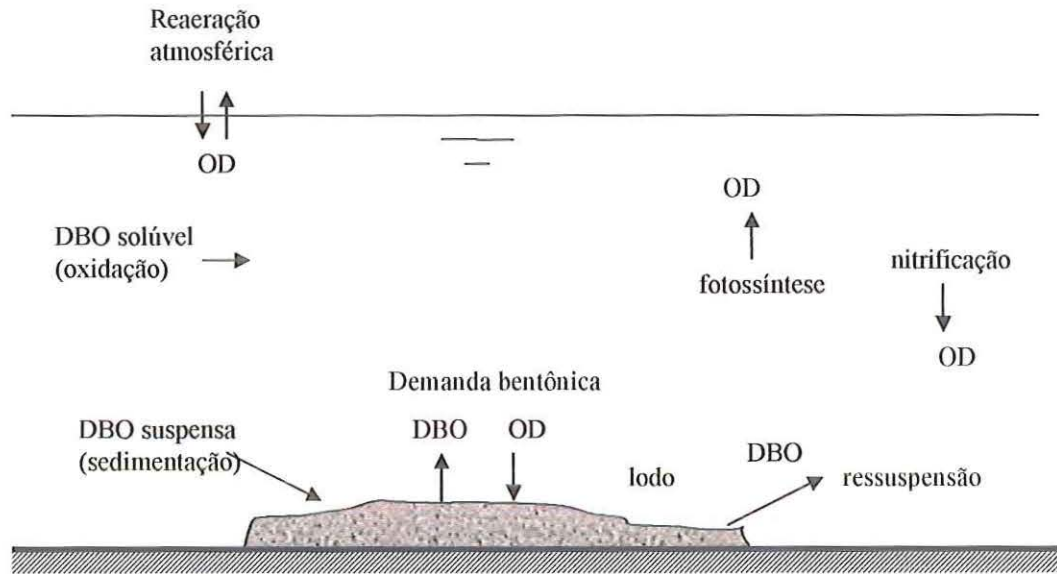
$N_1$  - concentração de amônia (mg-N/l)

$\alpha_6$  - taxa de consumo de oxigênio (oxidação) por unidade de concentração de nitrito (mg-O/mg-N)

$\beta_2$  - coeficiente da taxa de oxidação de nitrito ( $\text{dia}^{-1}$ )

$N_2$  - concentração de nitrito (mg-N/l)

A fig.(04) representa, no ambiente aquático, os principais mecanismos interagentes no balanço do oxigênio dissolvido.



**FIGURA 04-** Mecanismos interagentes no balanço do oxigênio dissolvido representados no ambiente aquático. (VON SPERLING, 1995).

### 2.2.2- MÉTODOS DE RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DO TRANSPORTE DE MASSA

Existem diversos métodos numéricos de resolução que podem ser utilizados para resolver equações diferenciais. Neste estudo nos interessa saber quais os métodos mais utilizados e que obtêm respostas acuradas na resolução da Equação de Transporte de Massa (para transporte de poluentes em cursos d'água) para regime não permanente, ou seja, que há variação no tempo. Entre os métodos encontrados na literatura podem ser destacados:

- Método de Runge-Kutta (terceira e quarta ordens);
- e o Método de MacCormack.

Todos os métodos numéricos são afetados por erros de diversas naturezas. Apesar disso, buscou-se usar métodos que apresentassem resultados com menores erros possíveis.

### 2.2.2.1- MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

Os métodos de Runge Kutta são muito utilizados para a resolução de equações diferenciais ordinárias, principalmente porque podem ser expressos por uma seqüência de fórmulas explícitas. Estes métodos utilizam o valor da função a ser resolvida no ponto médio do intervalo. O programa SAAM possui as funções D3 (Runge Kutta de terceira ordem) e D4 (Runge Kutta de quarta ordem) para cálculo de equações de interesse.

Como em Chapra (1997), os métodos de Runge-Kutta reúnem uma família de métodos numéricos que são usados extensivamente em modelagem de qualidade de água. Todos os métodos de Runge-Kutta têm como forma geral:

$$c_{i+1} = c_i + \phi.h \quad (06)$$

onde cada símbolo representa:

$\phi$  - a inclinação estimada (j ou formalmente chamado de incremento da função).

h - o intervalo de tempo ( $h = (t_{i+1} - t_i)$ ).

O método de Runge-Kutta mais comumente usado é o método clássico de quarta ordem que tem a forma:

$$c_{i+1} = c_i + \left[ \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \right] h \quad (07)$$

sendo

$$k_1 = f(t_i, c_i)$$

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{1}{2}h, c_i + \frac{1}{2}hk_1\right)$$

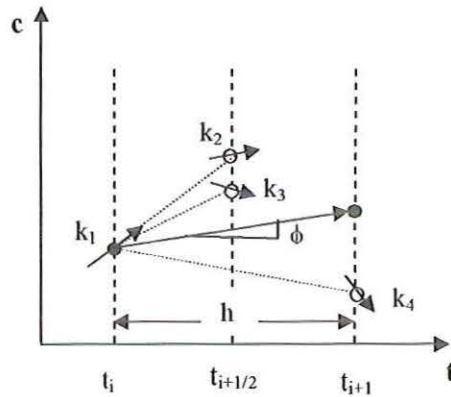
$$k_3 = f\left(t_i + \frac{1}{2}h, c_i + \frac{1}{2}hk_2\right)$$

$$k_4 = f(t_i + h, c_i + hk_3)$$

observando que  $f(t, c) = \frac{dc}{dt}(t, c)$ .

As funções ( $k_1, k_2, k_3$  e  $k_4$ ) são meramente a equação diferencial avaliada nos valores específicos de t e c, como mostrado na fig.(05).





**FIGURA 05-** Descrição gráfica do Método de Runge-Kutta de quarta ordem. (CHAPRA, 1997).

Na primeira fase deste estudo utilizou-se a equação fundamental de transporte de massa por advecção-dispersão excluindo-se o efeito de decaimento de reação de primeira ordem eq.(01). Esta equação foi discretizada em relação ao espaço tornando-se uma equação diferencial ordinária com variação somente no tempo, da seguinte forma:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{(AD_L)(C_{i+1} - C_i)}{A \cdot \Delta x^2} - \frac{(AD_L)(C_{i-1} - C_i)}{A \cdot \Delta x^2} + \frac{Q_{i-1}C_{i-1} - Q_i C_i}{A \Delta x} \quad (08)$$

Note que esta equação é similar à eq.(04) a menos dos termos de reação, fontes internas e externas.

A eq.(08) foi reescrita para cada trecho de rio para as simulações da primeira etapa deste estudo utilizando o programa SAAM.

### 2.2.2.2- MÉTODO DE MACCORMACK

MacCormack\* (1969 apud CHAPRA, 1997) desenvolveu este método de aproximação chamado de preditor-corretor. Este método é explícito e é constituído de quatro etapas de cálculo para cada instante de tempo considerado.

Como primeira etapa, faz-se a previsão da inclinação do ponto de base (valor inicial) (discretização do termo advectivo de forma progressiva):

$$s_{1,i} = -U \frac{c_{i+1}^l - c_i^l}{\Delta x} + D_L \frac{c_{i+1}^l - 2c_i^l + c_{i-1}^l}{(\Delta x)^2} - kc_i^l \quad (09)$$

sendo,

$$s_{1,i} = \frac{dc}{dt},$$

c- concentração do constituinte,

i-1, i, i+1- (subscritos encontrados nos c's) indicam as posições (trechos) onde a concentração está sendo computada,

l - (sobrescrito) significa o primeiro intervalo de tempo

A inclinação encontrada é então usada para fazer a previsão da concentração no instante de tempo seguinte

$$c_i^{l+1} = c_i^l + s_{1,i} \Delta t \quad (10)$$

l +1- (sobrescrito) significa o intervalo de tempo seguinte

Os valores encontrados pela eq.(10), são agora usados para se fazer a estimativa da inclinação no fim do intervalo (discretização do termo advectivo de forma regressiva),

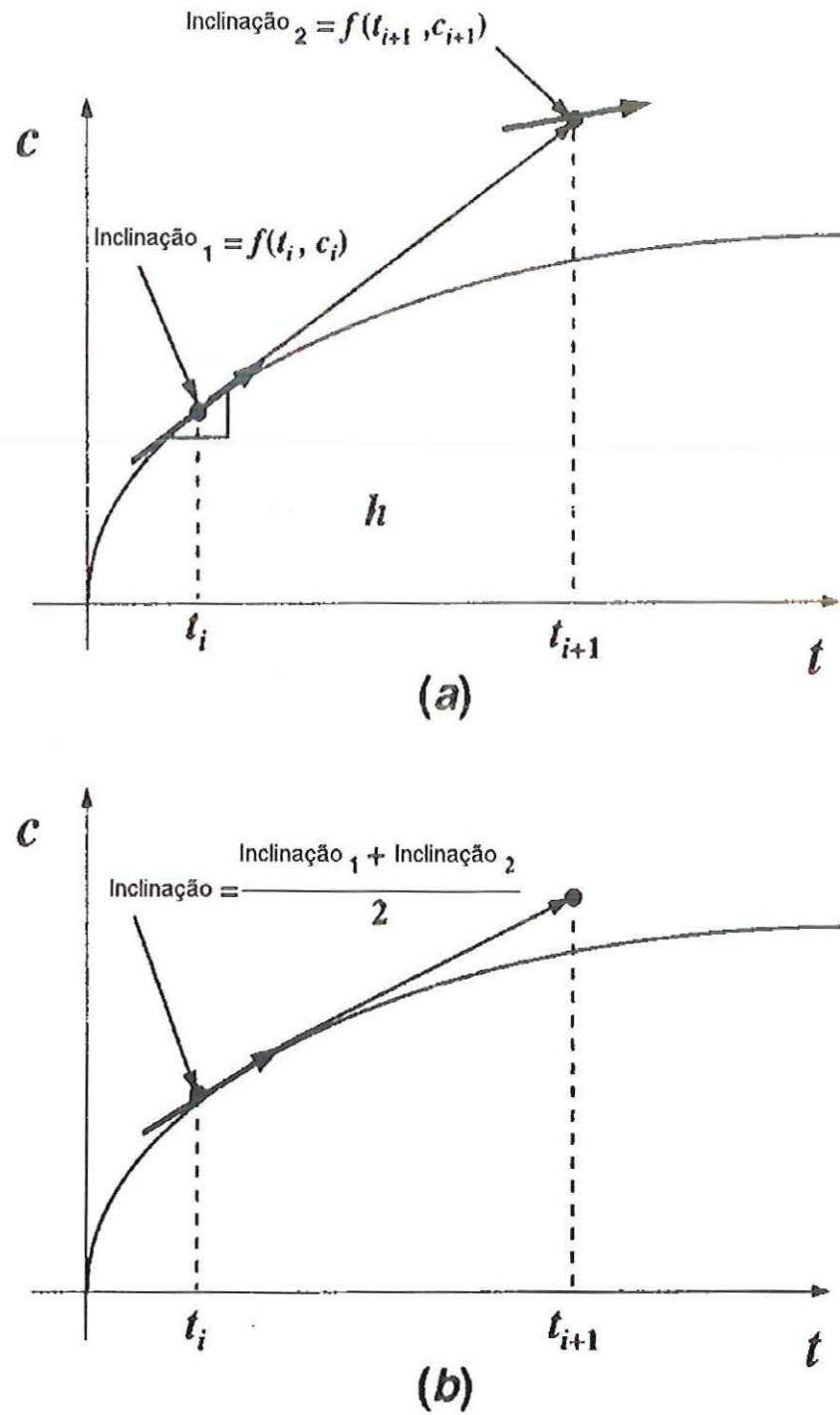
$$s_{2,i} = -U \frac{c_i^{l+1} - c_{i-1}^{l+1}}{\Delta x} + D_L \frac{c_{i+1}^{l+1} - 2c_i^{l+1} + c_{i-1}^{l+1}}{(\Delta x)^2} - kc_i^{l+1} \quad (11)$$

Finalmente, faz-se uma média das duas inclinações para se obter os valores finais corrigidos. A última etapa tem a forma,

$$c_i^{l+1} = c_i^l + \left( \frac{s_{1,i} + s_{2,i}}{2} \right) \Delta t \quad (12)$$

\* MACCORMACK, R. W. (1969). *The Effect of Viscosity in Hypervelocity Impact Cratering*. Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. Paper 69-354.

A figura a seguir ilustra de forma mais clara o processo de cálculo de MacCormack.



**FIGURA 06-** Descrição gráfica do Método de MacCormack. (CHAPRA, 1997).

(a) Previsão; (b) Correção.

O Método de MacCormack, por ser explícito, possui restrições quanto à estabilidade mas, de acordo com a literatura, é um dos métodos mais estáveis e de fácil controle bastando, para isso, fazer a escolha dos incrementos de espaço e tempo adequados. Além disso, ele tem a vantagem de não ser afetado por dispersão numérica (devido à forma de discretização do termo de advecção) e ser de razoável facilidade de programação.

### 2.2.3- ERROS NUMÉRICOS

A solução numérica da equação unidimensional do transporte de massa (eq.(01)) usando o método de diferenças finitas constitui-se em uma aproximação da solução real (analítica), isto conduz sempre a algum tipo de erro numérico (LIMA, 1997). Os erros numéricos correspondem a desvios de arredondamento, falta de estabilidade, assimetria e dispersão numérica.

A fig.(7.A) representa um erro de preservação de massa onde ocorre a redução da área abaixo da curva do perfil de concentração comparando-se o resultado gerado pela solução numérica com o resultado analítico. Este erro pode ser classificado como sendo de ordem zero.

A fig.(7.B) representa um erro de oscilação numérica que é relacionado diretamente ao conceito de estabilidade numérica. Muitas vezes, isto ocorre devido à retirada de uma maior quantidade de massa de uma célula de discretização do que realmente a quantidade presente no instante de tempo analisado.

A fig.(7.C) representa um erro de fase procedente do desvio da velocidade de translação. Este pode ser classificado como erro de primeira ordem.

A fig.(7.D) representa um erro de perfil. Este erro é considerado como erro mais complexo onde ocorrem erros de ordens mais altas (segunda, terceira, etc...) com predominância quantitativa da difusão numérica e da assimetria.

A figura a seguir permite a visualização destes quatro tipos de erros em comparação com soluções analíticas.

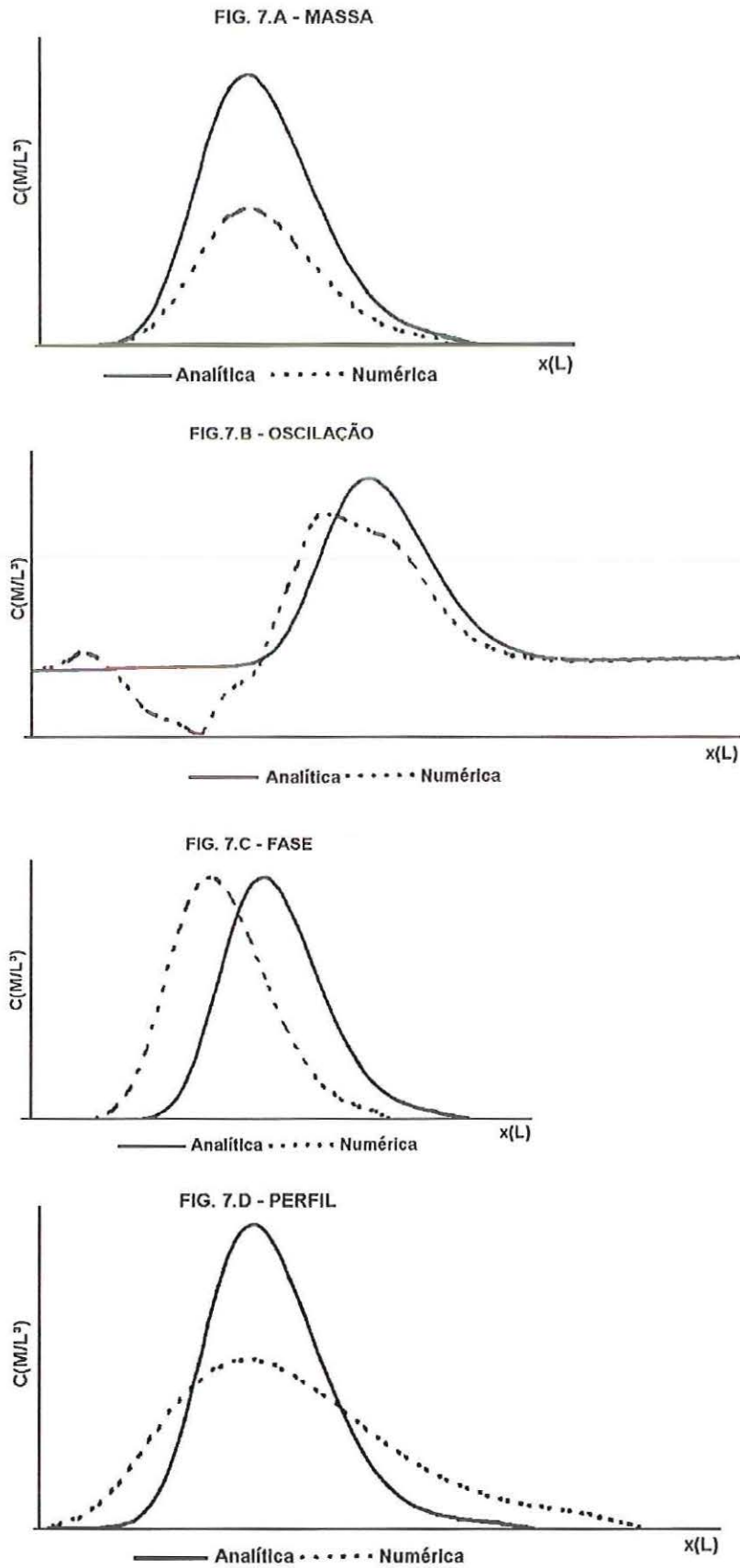


FIGURA 07- Ilustração dos principais erros numéricos. (LIMA, 1997).

Entre os erros numéricos destaca-se o erro que causa a dispersão numérica como o mais preocupante. Giorgetti (1998) descreve como ocorre a dispersão numérica. A seguir será mostrada a análise dos efeitos advectivos da equação clássica de transporte de massa (que produz os erros de dispersão numérica). Esta equação tem a forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (13)$$

Substituindo-se o primeiro termo por diferenças finitas progressivas e o segundo termo por diferenças finitas regressivas têm-se:

$$\frac{C_{i,n+1} - C_{i,n}}{\Delta t} + U \frac{C_{i,n} - C_{i-1,n}}{\Delta x} = 0$$

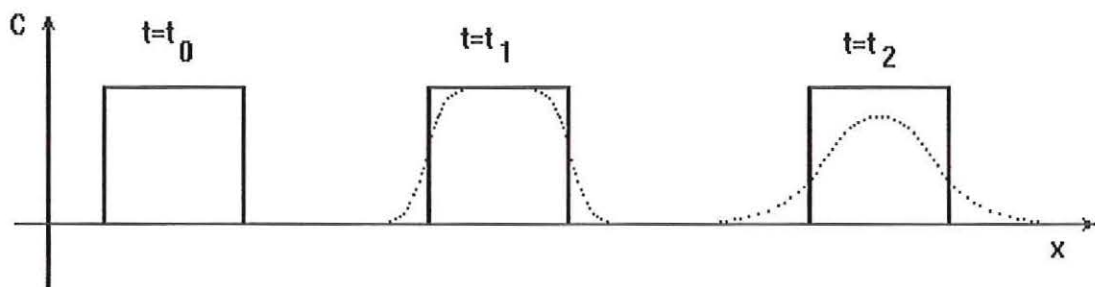
donde

$$C_{i,n+1} = C_{i,n} + \frac{U\Delta t}{\Delta x} (C_{i-1,n} - C_{i,n})$$

O termo  $\frac{U\Delta t}{\Delta x}$  é um adimensional que deve ser menor que ou igual a 1 por razões de estabilidade. Se este termo for igual a 1 e  $C_{i,n+1} = C_{i-1,n}$ , temos a solução exata para um transporte puramente advectivo. Quando se adota um valor de  $\frac{U\Delta t}{\Delta x} = 0,5$ , por exemplo, obtêm-se:

$$C_{i,n+1} = \frac{1}{2} C_{i,n} + \frac{1}{2} C_{i-1,n}$$

O algoritmo da equação acima não descreve a translação, sem dispersão, de uma fonte volumétrica uniforme (linha cheia da figura seguinte). Ao invés disso, produz resultados como os ilustrados pelas linhas pontilhadas da figura, como se houvesse difusão.



**FIGURA 08-** Representação esquemática do efeito de difusão numérica. (GIORGETTI, 1998).

O efeito da difusão numérica (ou dispersão numérica), como mostrado na fig.(08), ocorre quando  $U\Delta t/\Delta x$ , ou número de Courant (Cr), é menor ou igual a um. A análise a seguir permite um melhor entendimento do mecanismo responsável pela difusão numérica.

Usando-se séries de Taylor, pode-se expressar com maior exatidão os valores de  $C_{i,n+1}$  em função de  $C_{i,n}$ , e de  $C_{i-1,n}$  em função de  $C_{i,n}$ , em comparação com as aproximações de primeira ordem usadas logo depois da eq.(13).

Para a avaliação no tempo tem-se,

$$C_{i,n+1} = C_{i,n} + \Delta t \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \dots + TOS$$

sendo

TOS – termos de ordem superior

Para a avaliação no espaço tem-se,

$$C_{i-1,n} = C_{i,n} - \Delta x \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \dots + TOS$$

Donde,

$$\frac{C_{i,n+1} - C_{i,n}}{\Delta t} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \dots + TOS$$

$$\frac{C_{i,n} - C_{i-1,n}}{\Delta x} = \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \dots + TOS$$

Reescrevendo a equação aproximada que se segue à eq.(13), porém, usando-se os valores mais exatos dados pelas duas equações acima, obtém-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \dots + TOS + U \left( \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \dots + TOS \right) = 0$$

“As escalas temporais dos processos fluviais são muito grandes em comparação com as escalas temporais dos processos de transporte de poluentes ou traçadores. Isto é, as derivadas de U em relação ao tempo podem ser desprezadas em comparação com as derivadas de C em relação ao tempo” (GIORGETTI, 1998). Nestas condições pode-se dizer que  $\partial^2 C / \partial t^2 = U^2 \partial^2 C / \partial x^2$ . Substituindo-se esta condição e agrupando os termos da equação acima, obtém-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_n \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + TOS$$

, o termo  $D_n$  é o coeficiente de difusão (ou dispersão) numérica.

$$D_n = \frac{\Delta x}{2} U - \frac{U^2 \Delta t}{2} \quad (14)$$

A eq.(14) é válida para o cálculo do coeficiente de dispersão para o caso de esquema espacial de discretização regressivo. Na literatura pode ser encontrada a equação geral para ambos os casos de discretização espacial, esquema regressivo e progressivo

$$D_n = U \cdot \Delta x \left[ (\alpha - 0,5) - \frac{U \cdot \Delta t}{2 \cdot \Delta x} \right] \quad (15)$$

$\alpha=1$  para esquema regressivo

e  $\alpha=0,5$  para esquema progressivo

O adimensional  $U\Delta t/\Delta x$  deve ser menor do que ou igual a 1 para que  $D_n$  seja positivo (para que a Lei de Fick e Segunda Lei da Termodinâmica sejam respeitadas). Esta também é uma condição para a estabilidade da solução numérica. Só quando  $D_n$  é igual a zero, uma condição nem sempre possível, é que a difusão numérica não se manifesta. Sua ocorrência não é grave se  $D_n \ll D_L$  (coeficiente de difusão ou dispersão utilizado no modelo). Não sendo esta a situação, a cada passo pode-se subtrair de  $D_L$  o correspondente valor de  $D_n$ , para eliminar-se seu efeito.

De forma a reduzir os erros numéricos de dispersão e assimetria, através da eliminação dos termos de dispersão numérica e de assimetria deve-se fazer a adoção criteriosa dos incrementos de tempo  $\Delta t$  e de espaço  $\Delta x$ . As equações a seguir fornecem bons critérios para esta escolha:

$$\Delta x < \frac{D_L}{0,5 \cdot U} \quad (16)$$

sendo

$U$ = velocidade média

$D_L$  = coeficiente de dispersão longitudinal

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{U \cdot \Delta x \cdot (\alpha - \beta) + 2 \cdot D_L + k \cdot (\Delta x)^2} \quad (17)$$

sendo

$\Delta x$ = incremento de espaço

$k$ = coeficiente de decaimento de 1ª ordem

$\alpha=1$  para esquema regressivo e  $\alpha=0,5$  para esquema progressivo ou centralizado



$\beta=0$  para esquema regressivo e  $\beta=0,5$  esquema centralizado

Para sistemas altamente advectivos (velocidades muito altas) deve-se observar a seguinte restrição do número de Peclet ( $P_e$ ):

$$P_e = \frac{U \cdot \Delta x}{D_L} < 2 \quad (18)$$

### 3- METODOLOGIA

---

Nos capítulos anteriores foram apresentadas a fundamentação teórica e a revisão bibliográfica que servem de base para o desenvolvimento do trabalho.

A proposta do estudo constou basicamente em duas fases:

- 1ª Fase:
  - Escolha da equação unidimensional do transporte de massa por advecção e dispersão, constante da literatura, para a capacitar o programa SAAM for Windows a simular o transporte de poluentes em cursos d'água;
  - Implementação da equação, citada anteriormente, discretizada pelo método de diferenças finitas no programa SAAM original;
  - Simulação de alguns cenários no SAAM através do método de resolução de Runge-Kutta;
  - Comparação dos resultados obtidos pela simulação no SAAM com os resultados produzidos pelo programa similar QUAL2E e também, com resultados analíticos;
  - Análise da eficiência dos resultados obtidos.
- 2ª Fase:
  - Foram encontradas diferenças nos resultados obtidos no final da 1ª fase, com isto, partiu-se para a investigação mais aprofundada das causas destas diferenças;
  - Encontrados as causas das diferenças entre os resultados optou-se por escolher outro método de resolução. Após o estudo dos diversos métodos contidos na literatura, o método escolhido foi o de MacCormack;
  - Atualização do programa SAAM para a versão 6.0 do Visual Basic;
  - Intervenção no programa SAAM para torná-lo mais prático;
  - Implementação do método de MacCormack;

- Simulação de alguns cenários no programa SAAM for Windows com o uso do método de resolução de MacCormack;
- Comparação dos resultados obtidos pela simulação no SAAM com os resultados produzidos pelo programa QUAL2E e resultados analíticos;
- Análise da eficiência dos resultados obtidos;
- Como os resultados foram bastante satisfatórios, partiu-se para a implementação do SAAM com as funções para a avaliação de OD e DBO de forma simplificada;
- Simulação no SAAM de alguns cenários para a avaliação de OD e DBO;
- Comparação dos resultados obtidos pela simulação no SAAM com os resultados produzidos pelo programa QUAL2E;
- Análise da eficiência dos resultados obtidos;
- Elaboração de conclusões e sugestões.

Vale ressaltar que o trabalho baseou-se em modelo de qualidade de água constante da literatura para situações de derramamento instantâneo de poluente (conservativo e não conservativo).

## 4- RESULTADOS FINAIS E DISCUSSÃO

---

### 4.1- Primeira fase

No trabalho de implementação do SAAM utilizou-se, na primeira fase, a eq.(03) discretizada pelo método de diferenças (desprezando-se os termos de reação e fontes/sumidouros) que foi então resolvida pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Nesta seção são apresentados os procedimentos adotados para as simulações, em regime não permanente, nos programas QUAL2E e SAAM. Foram usados, para tais simulações, dois casos de cursos d'água com injeção instantânea de poluente. O primeiro é o exemplo 12.1 do livro de Chapra (com algumas diferenças) e o segundo é um rio hipotético.

Além de se analisarem os resultados obtidos pela simulação nos dois programas (SAAM e QUAL2E) e suas conseqüentes comparações, foi realizada também a comparação com resultados analíticos para cada cenário analisado. Para tanto foi utilizada a formulação de O'Loughlin & Bowmer\* (1975 apud Harleman, 1975) para fonte plana instantânea que configura os exemplos estudados a seguir. Esta formulação tem a forma:

$$c = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_L t}} \exp\left\{-\left[\frac{(x-x_1)-Ut}{4D_L t}\right]^2 + kt\right\} \quad (19)$$

onde

M – massa do constituinte (poluente, contaminante, etc) (M)

A – área da seção transversal (L<sup>2</sup>)

D<sub>L</sub> – dispersão longitudinal (L<sup>2</sup>/T)

---

\* O'LOUGHLIN, E. M. & BOWMER, K.H. (1975). Dilution and decay of aquatic herbicides in flowing channels. *Journal of Hidrology*, v.6, p.217-235, 1975.

$t$  – tempo (T)

$x$  – posição de interesse (L)

$x_1$  – posição de injeção do constituinte (poluente, contaminante, etc) (L)

$U$  – velocidade média do curso d'água (L/T)

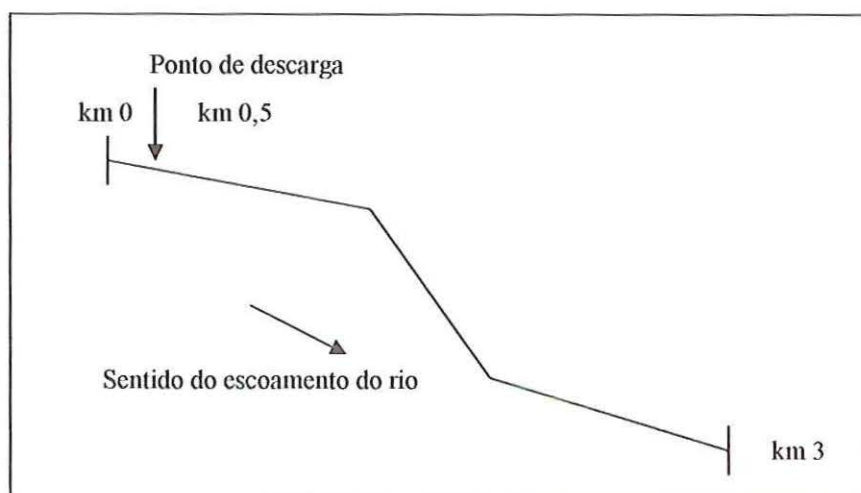
$k$  – constante de decaimento do constituinte ( $T^{-1}$ )

### Caso 1:

O exemplo 12.1 do livro de Chapra se trata de um rio que recebe uma descarga instantânea de 5kg de uma substância conservativa (poluente) na posição de 0,5km a jusante de uma cidade. O transporte desta substância conservativa foi analisado até uma distância de 3km. O rio em questão apresenta as características indicadas abaixo:

- Profundidade  $d= 1$  m;
- Largura do canal  $B= 60$  m;
- Área transversal  $A= 60$  m<sup>2</sup>;
- Vazão  $Q= 144000$  m<sup>3</sup>/h;
- Velocidade  $U= 2400$  m/h;
- Dispersão Longitudinal  $D_L= 150000$  m<sup>2</sup>/h.

Para as simulações em ambos programas QUAL2E e SAAM, o trecho do rio de 3km foi dividido em 30 trechos de 0,1km cada numerados de montante para jusante. Foi considerado que, inicialmente, o curso d'água apresentava concentração da substância conservativa de 0 mg/l em todos os trechos de rio exceto, no trecho 5, que devido à descarga do poluente, gerou uma concentração de 0,833 mg/l. A fig.(09) representa-se o rio em questão.



**FIGURA 09-** Representação esquemática do rio estudado com a indicação do ponto de descarga e o sentido do escoamento.

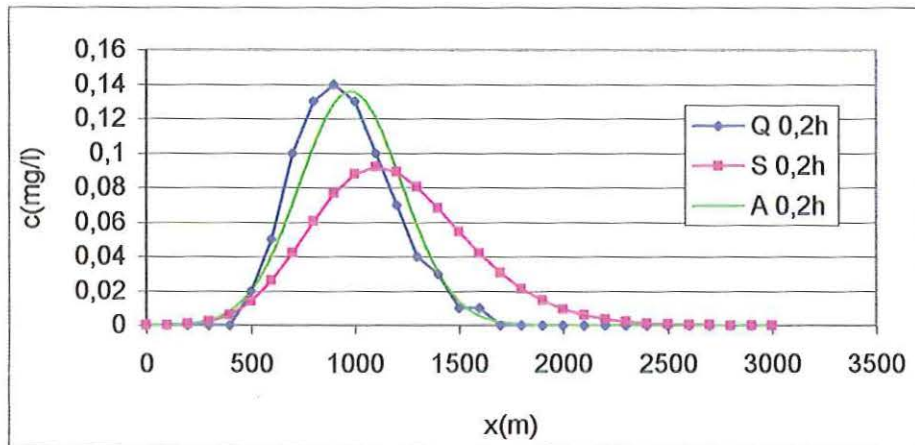
Considerou-se também que houve mistura lateral e vertical completa (condição também adotada para simulação no programa QUAL2E) ao se injetar esta “massa” de poluente no trecho 05 do rio.

O caso analisado em questão é de um lançamento de um constituinte conservativo, o que faz com que  $k$  seja igual a 0.

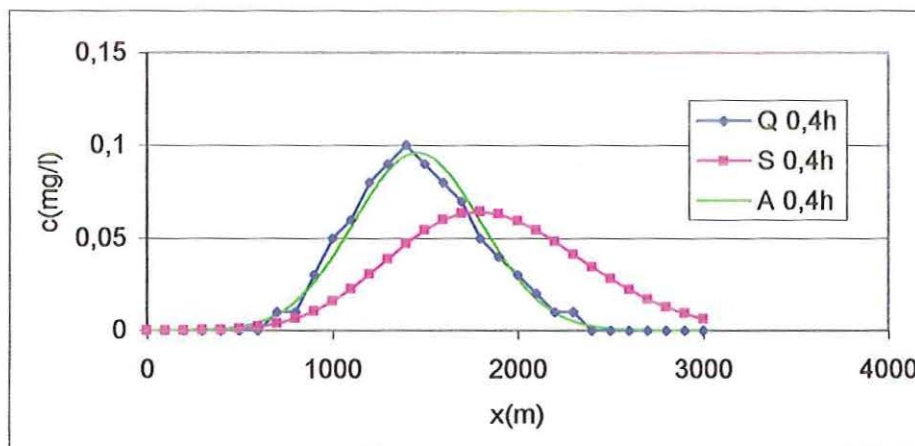
Os incrementos de tempo e espaço ( $\Delta t$  e  $\Delta x$ ) foram escolhidos seguindo os critérios citados na seção 2.2.3 eq. (16) e (17).

Foi calculado o número de Courant para este rio em estudo e se obteve  $Cr < 1$  ( $Cr = 0,24$ ), o que significa que há dispersão numérica neste caso. Realizou-se o cálculo da dispersão numérica pela eq. (14) com o intuito de se minimizar seu efeito a cada passo da simulação. Como resultado se obteve  $D_n$  (dispersão numérica) com o valor de  $91200 \text{ m}^2/\text{h}$ . Este valor foi subtraído do coeficiente de dispersão no programa SAAM ( $D_L - D_n = 150000 - 91200 = 58800 \text{ m}^2/\text{h}$ ). O programa QUAL2E reduz este efeito automaticamente.

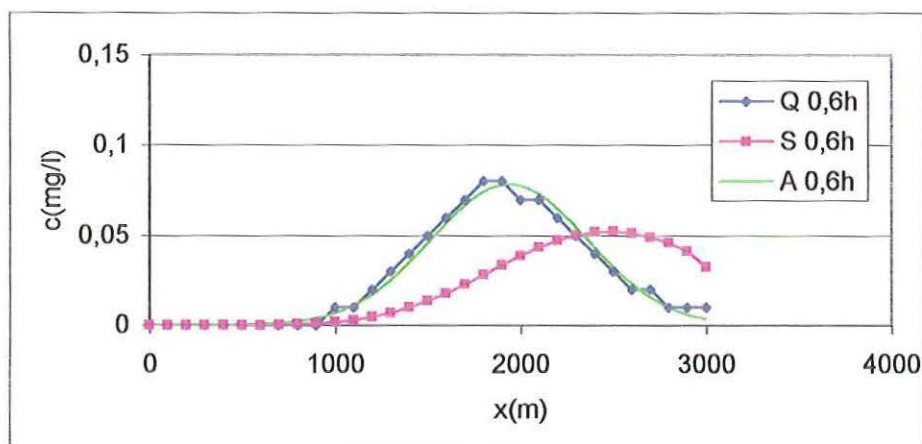
A seguir são mostrados os perfis de concentração da substância conservativa ao longo dos 3 km do curso d'água estudado em diversos instantes de tempo. O “Q” da legenda significa o resultado da simulação com o programa QUAL2E, o “S” com o programa SAAM e o “A” resultado produzido por solução analítica. O número e a letra “h” que se seguem às letras citadas (Q, S e A) significam o instante de tempo considerado na simulação.



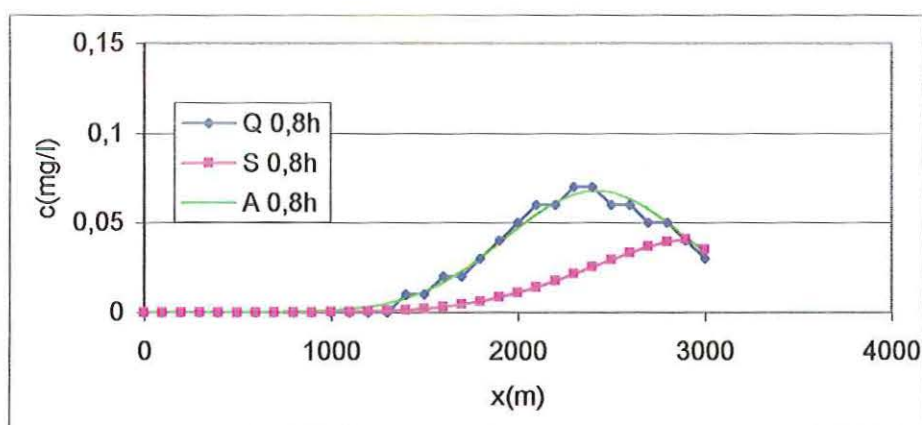
**FIGURA 10-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,2 h - Caso 1.



**FIGURA 11-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,4 h - Caso 1.



**FIGURA 12-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,6 h – Caso I



**FIGURA 13-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,8 h – Caso I

Observa-se nestas figuras que há diferença entre os resultados produzidos pela simulação com os programas QUAL2E e SAAM e o resultado analítico. Pode-se confirmar que a simulação com o QUAL2E produziu resultados mais próximos da solução exata. As diferenças encontradas entre os perfis de concentração da substância em análise produzidos pelo QUAL2E e pelo SAAM, se devem ao fato de haver dispersão numérica pela forma de discretização de diferenças finitas regressiva onde se desprezam termos de maior grau (discutido no item 2.2.2), além do erro incluso na forma de resolução pelo método de Runge-Kutta usado pelo SAAM (já que o método se



adapta melhor aos casos de esquemas progressivos e não regressivos). Pode-se destacar neste caso erros de perfil e de fase.

## Caso 2

Este exemplo trata-se de um rio hipotético. O rio recebe uma descarga instantânea de 1kg de uma substância conservativa na posição de 300m a jusante do ponto inicial considerado. O transporte desta substância conservativa foi analisado até uma distância de 2km. O curso d'água em questão apresenta as características indicadas abaixo:

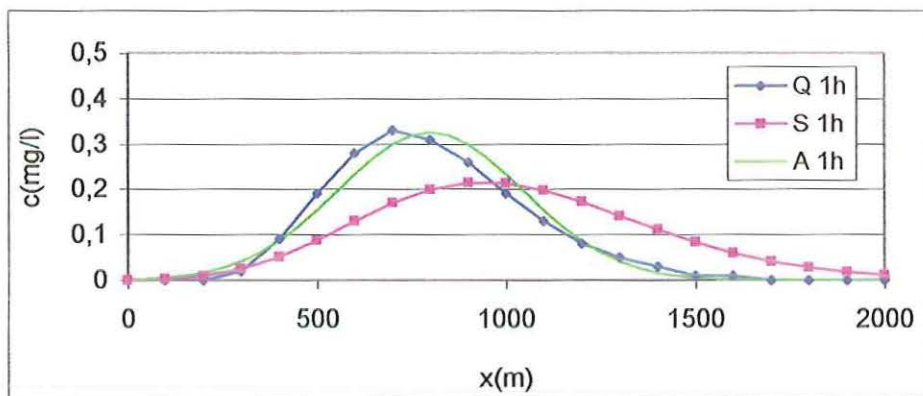
- Profundidade  $d= 0,5$  m;
- Largura do canal  $B= 10$  m;
- Área transversal  $A= 5$  m<sup>2</sup>;
- Vazão  $Q= 2500$  m<sup>3</sup>/h;
- Velocidade  $U= 500$  m/h;
- Dispersão Longitudinal  $D_L= 30000$  m<sup>2</sup>/h.
- Substância conservativa  $k=0$ .

Como no exemplo anterior, para as simulações em ambos programas QUAL2E e SAAM, foi considerado que inicialmente o curso d'água apresentava concentração da substância conservativa de 0 mg/l em todos os trechos do rio exceto na posição de 300m, que devido à descarga de 1kg do poluente, gerou uma concentração de 2 mg/l. O trecho do rio de 2km de extensão foi dividido em 20 trechos de 100m cada.

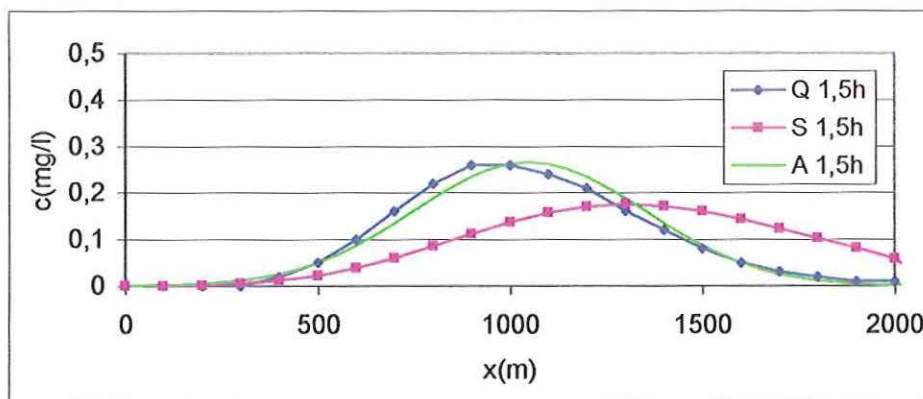
Os incrementos de tempo e espaço ( $\Delta t$  e  $\Delta x$ ) foram escolhidos seguindo os critérios citados na seção 2.2.3 eq. (16) e (17).

Foi feito o cálculo do número de Courant para este caso e foi encontrado um valor menor que 1 ( $Cr=0,25$ ), o que significa que há dispersão numérica neste caso. A dispersão numérica calculada pela eq.(14) resultou:  $D_n= 18750$  m<sup>2</sup>/s. Para minimizar o efeito de dispersão numérica o valor de  $D_n$  foi subtraído do coeficiente de dispersão. No programa SAAM o  $D_L$  usado foi igual a 11250 m<sup>2</sup>/h ( $D_L-D_n= 30000-18750= 11250$  m<sup>2</sup>/h).

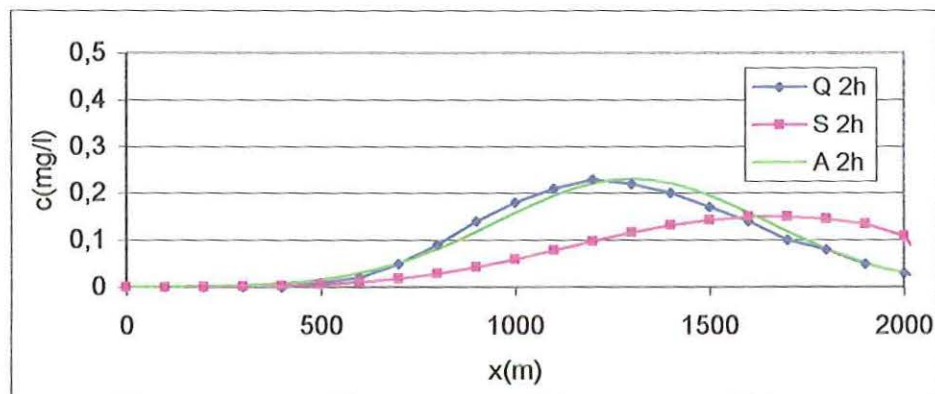
A seguir são mostrados os perfis de concentração da substância conservativa ao longo dos 2 km do curso d'água estudado em diversos instantes de tempo. Os gráficos são apresentados da mesma forma que o exemplo anterior.



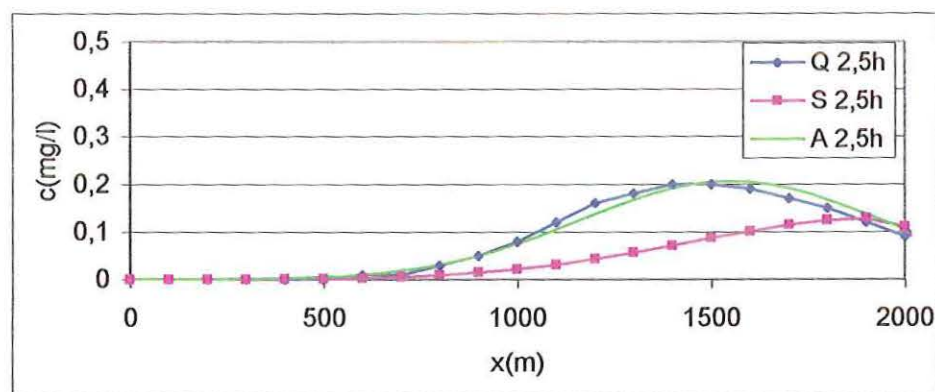
**FIGURA 14-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso2.



**FIGURA 15-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1,5 h – Caso2.



**FIGURA 16-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2 h – Caso2



**FIGURA 17-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2,5 h – Caso2.

Como é possível observar há diferença entre os resultados produzidos pela simulação com os programas QUAL2E e SAAM e o resultado analítico. Pode-se observar que os resultados produzidos pela simulação com o SAAM não foram muito bons. Este apresenta erro de perfil e fase em relação ao resultado analítico. As diferenças encontradas entre os perfis de concentração da substância em análise produzidos pelo SAAM, se devem aos fatos relatados no exemplo anterior.

Foi realizada uma investigação mais aprofundada dos “erros” envolvidos no processo de simulação do SAAM com o fim de minimizá-los. Como não foi possível eliminar tais erros, foi estudada a viabilidade da utilização de um outro modelo de

transporte de massa pelo programa SAAM. Optou-se então por implementar o programa SAAM com o Método de MacCormack que de acordo com a literatura e testes realizados, produz muito bons resultados.

#### 4.2- Segunda fase

O propósito desta fase foi o de implementar o programa SAAM com Método de MacCormack para simulação de transporte de substâncias conservativas e não conservativas em cursos d'água e demonstrar os bons resultados produzidos pela sua utilização. Para tanto foi necessário atualizar o programa fonte para uma versão mais recente (6.0) da linguagem de programação Microsoft *Visual Basic* o que consumiu um tempo enorme não vislumbrado quando da sugestão do projeto além de diversas adaptações para que as novas funções fossem implementadas.

O programa SAAM foi também implementado para simulação de DBO (demanda bioquímica de oxigênio) e OD (oxigênio dissolvido) para casos mais simples onde não se considera a presença de algas, nitrogênio nas formas de amônia e nitrito e consumo de oxigênio pela camada bentônica (eq.(05) reduzida). O SAAM possui agora diversas inovações em relação à primeira versão. Entre elas: sistemática de busca, edição e criação de fórmulas de maneira mais prática, funções de logaritmo em diversas bases e logaritmo neperiano, além das funções principais já citadas (Método de MacCormack, DBO e OD).

A seguir são mostradas as formulações de DBO e OD implementadas no programa SAAM.

Para cálculo de DBO:

$$\frac{dL}{dt} = -k_1 \cdot L - k_3 L \quad (20)$$

sendo,

L – concentração de DBO carbonácea (M/L<sup>3</sup>)

k<sub>1</sub> – coeficiente de desoxigenação (T<sup>-1</sup>)

k<sub>3</sub> – coeficiente de sedimentação da DBO (T<sup>-1</sup>)

Para cálculo de OD:

$$\frac{dC}{dt} = k_2 (C_s - C) - k_1 L \quad (21)$$

sendo

$k_2$  - coeficiente de reaeração ( $T^{-1}$ )

$C_s$  - concentração de saturação de oxigênio dissolvido, nas condições de pressão e temperatura locais ( $M/L^3$ )

$C$  - concentração do oxigênio dissolvido ( $M/L^3$ )

$k_1$  - coeficiente de desoxigenação ou de decaimento da DBO ( $T^{-1}$ )

$L$  - concentração da DBO (carbonácea final) ( $M/L^3$ )

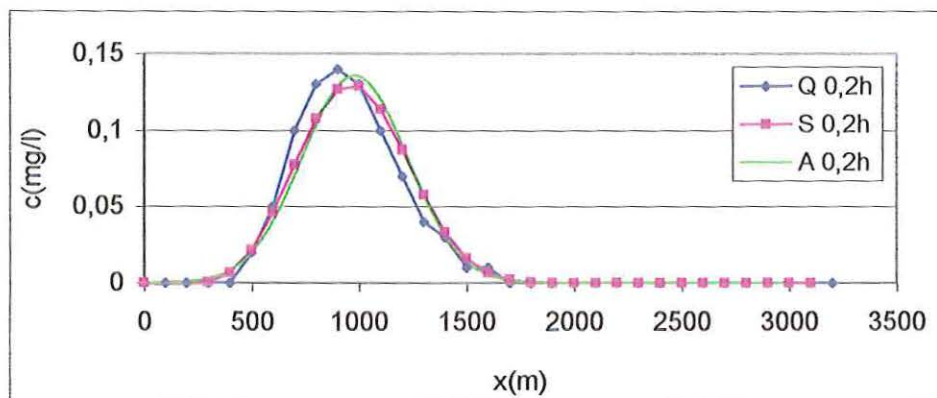
Nesta seção são apresentados os procedimentos adotados para as simulações, em regime não permanente, nos programas QUAL2E, SAAM (modificado) e seus resultados comparando-os com a solução analítica gerada pela eq.(19). Foram usados, para tais simulações, os dois casos analisados na primeira etapa deste estudo, dois casos de injeção instantânea de poluente (um de substâncias conservativas e um de substância não conservativa), além de dois casos analisando-se concentrações de DBO e OD.

### Caso 3

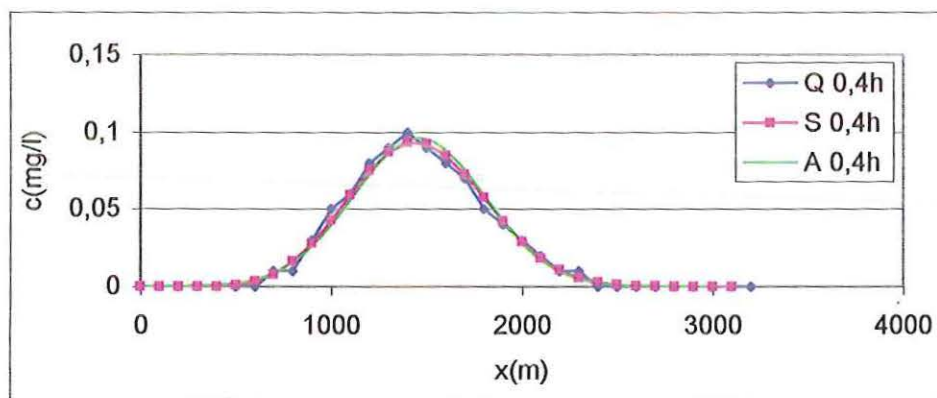
Este caso, trata-se do mesmo exemplo do Caso1 simulado, agora, com o programa QUAL2E e com o programa SAAM, usando-se o Método de MacCormack e comparados entre si conjuntamente com a solução analítica (produzida pela eq.(19)) como anteriormente.

Com o uso do Método de MacCormack os resultados não são afetados pela dispersão numérica como explicado na seção 2.2.2.2. Além disso, como já se sabe, o QUAL2E reduz o efeito da dispersão numérica automaticamente.

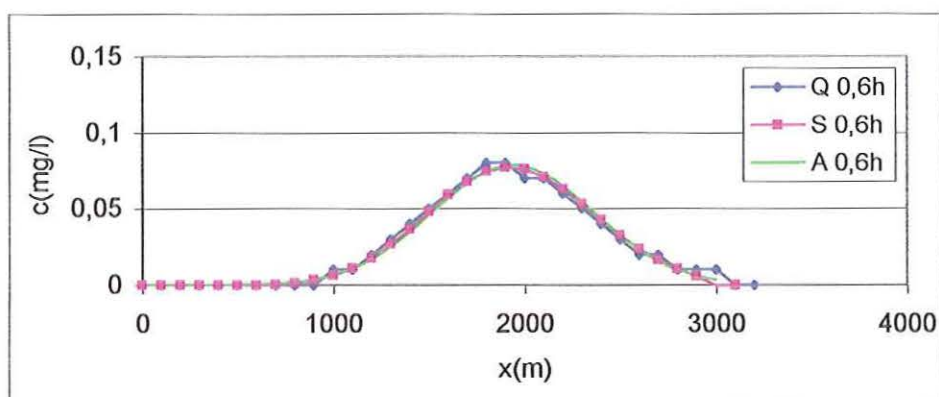
A seguir são mostrados os perfis de concentração da substância conservativa ao longo dos 3 km do curso d'água em questão em alguns instantes de tempo. Os gráficos são apresentados da mesma forma que os exemplos anteriores.



**FIGURA 18-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,2 h – Caso3.



**FIGURA 19-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,4 h – Caso3.



**FIGURA 20-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 0,6 h – Caso3.

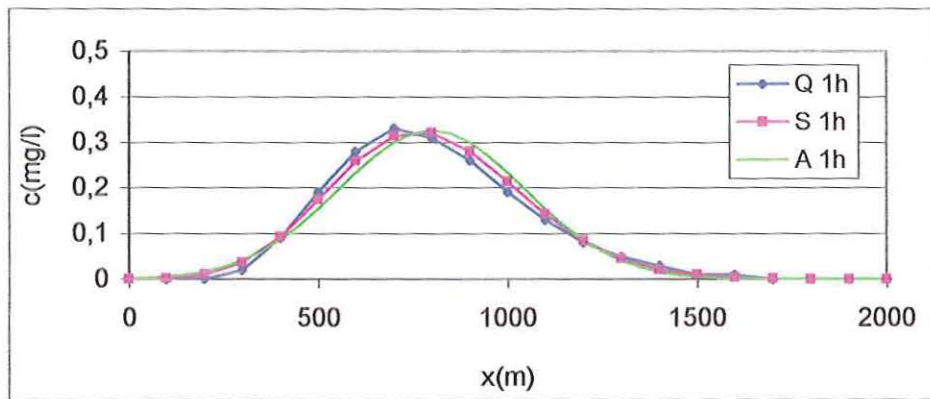
Como é possível observar os resultados produzidos pela simulação com o programa SAAM usando-se o Método de MacCormack foram muito bons. Os perfis comparativos de concentração resultantes das simulações com os programas QUAL2E, SAAM e resultado analítico praticamente se aderem.

#### Caso 4

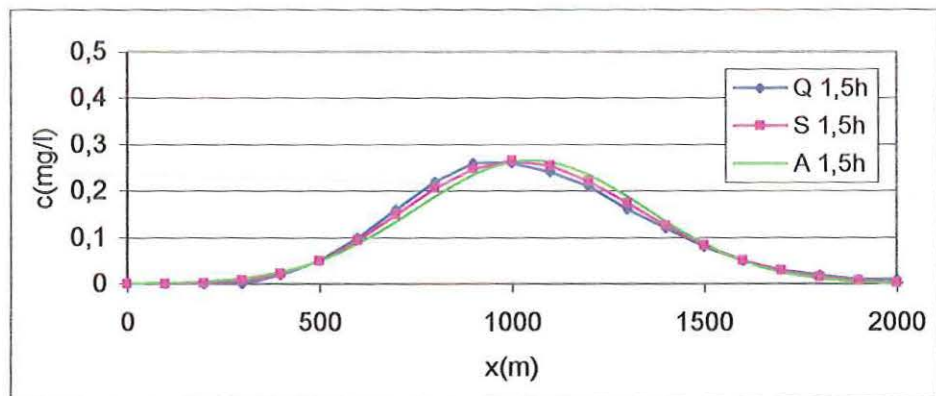
Este caso se trata do mesmo exemplo do Caso2, com as mesmas características, usando-se como diferencial o programa SAAM implementado com o Método de MacCormack. Os resultados obtidos com a simulação feita no programa SAAM são comparados com os resultados obtidos com o QUAL2E e a solução analítica (eq.(19)), como anteriormente.

Os resultados não são afetados pela dispersão numérica devido `a mesma explicação do caso anterior.

São mostrados a seguir os perfis de concentração da substância conservativa resultantes das simulações com o QUAL2E, SAAM e solução analítica ao longo dos 2 km do rio em alguns instantes de tempo. Os gráficos são apresentados da mesma forma que os exemplos anteriores.

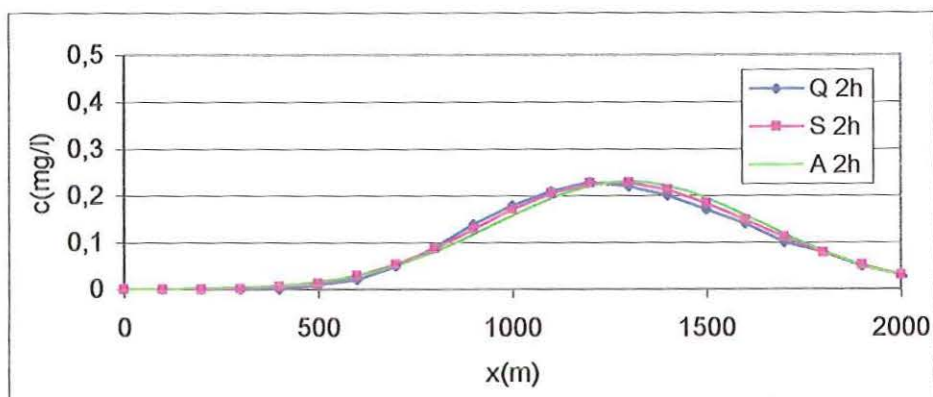


**FIGURA 21-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso4.

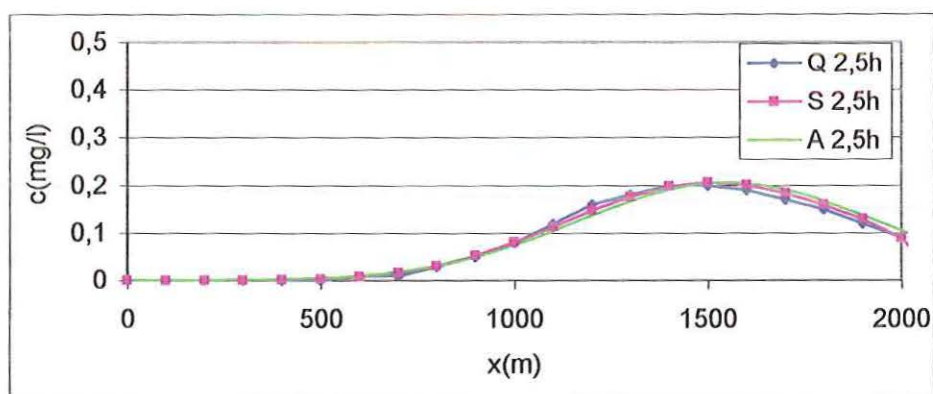


**FIGURA 22-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1,5 h – Caso4.





**FIGURA 23-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2 h – Caso4.



**FIGURA 24-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2,5 h – Caso4.

Como é possível observar, os resultados produzidos pela simulação com os programas QUAL2E e SAAM (modificado) em relação ao resultado analítico praticamente se aderem. Os resultados produzidos pela resolução com o uso do SAAM não exibem erro de fase e perfil como no caso2. Pode-se então considerar como satisfatório o desempenho do SAAM (modificado) para este caso.

### Caso 5

Este caso coincide com o mesmo exemplo do Caso2 com as mesmas características exceto que o rio recebe uma descarga instantânea de 10kg de um contaminante reativo (substância não conservativa) na posição de 300m a jusante do ponto inicial considerado. O transporte desta substância foi analisado até uma distância de 2km.

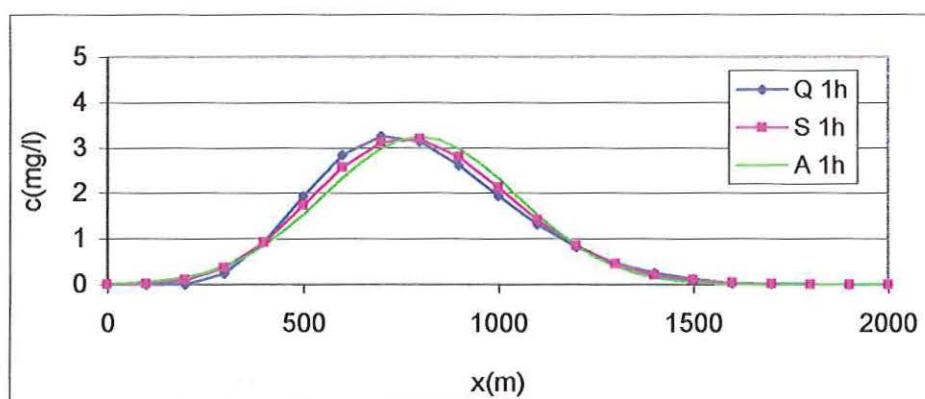
A substância não conservativa possui constante de decaimento de primeira ordem de  $0,1 \text{ dia}^{-1}$ .

Para as simulações com o uso dos programas QUAL2E e SAAM, foi considerado que inicialmente o curso d'água apresentava concentração da substância de 0 mg/l em todos os trechos do rio exceto na posição de 300m, que devido à descarga de 10kg do poluente, gerou uma concentração de 20 mg/l. O trecho do rio de 2km de extensão foi dividido em 20 trechos de 100m cada.

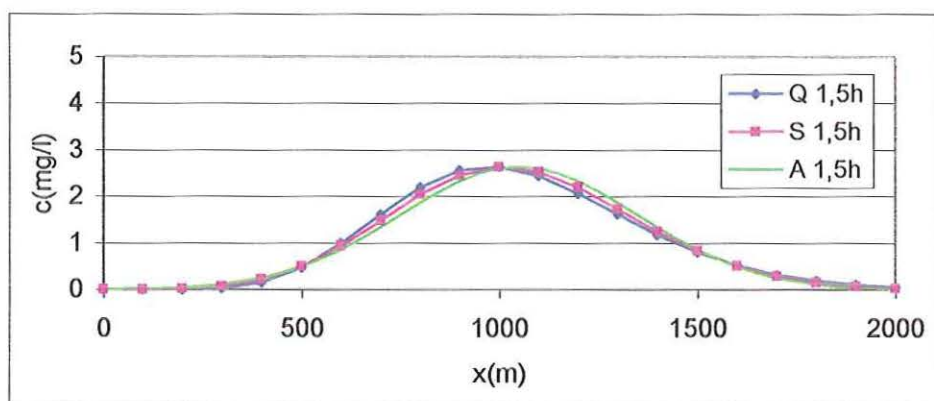
Os incrementos de tempo e espaço ( $\Delta t$  e  $\Delta x$ ) foram escolhidos seguindo os critérios citados na seção 2.2.3 eq. (16) e (17).

Os resultados não são afetados pela dispersão numérica devido aos métodos utilizados.

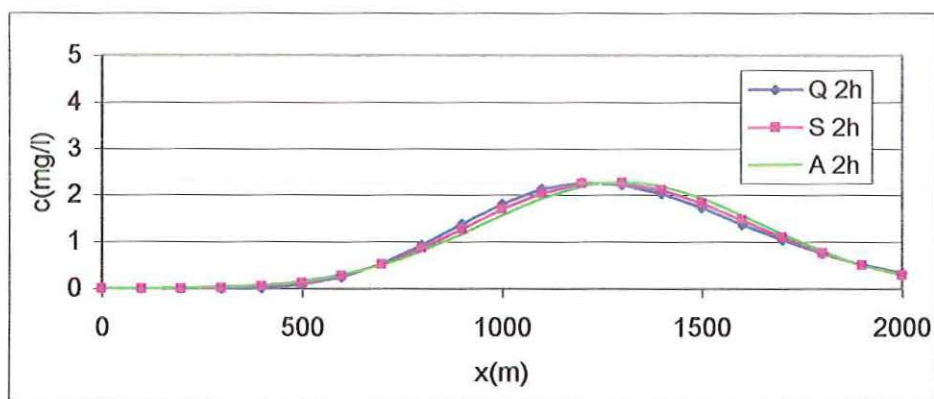
A seguir são mostrados os perfis de concentração da substância não conservativa ao longo dos 2 km do curso d'água estudado em diversos instantes de tempo. Os gráficos são apresentados da mesma forma que o exemplo anterior.



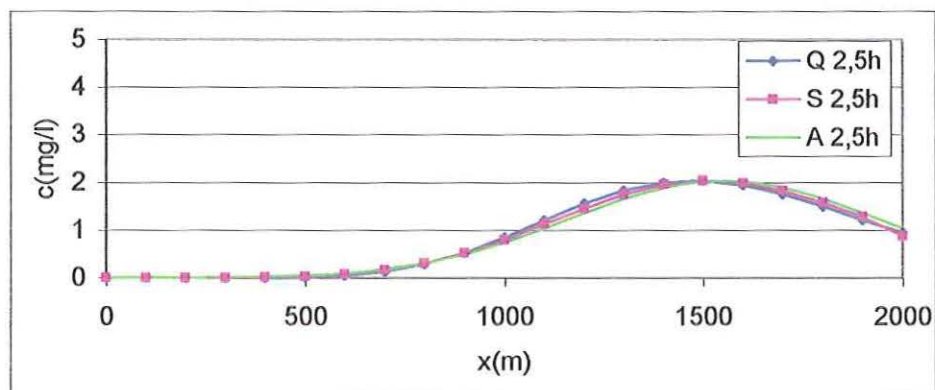
**FIGURA 25-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso5.



**FIGURA 26-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1,5h – Caso5.



**FIGURA 27-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2h – Caso5.



**FIGURA 28-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 2,5h – Caso5.

Observa-se que os resultados produzidos pela simulação com os programas QUAL2E e SAAM (modificado) em relação ao resultado analítico praticamente se aderem. Os resultados produzidos pela resolução com o uso do SAAM não exibem erro de fase e perfil como no caso2. Pode-se considerar como satisfatório o desempenho do SAAM (modificado) para este caso.

### Caso 6

Este caso trata-se de um rio hipotético que recebe uma descarga instantânea de 2kg de substância conservativa na posição de 2km a jusante de sua cabeceira. O transporte desta substância foi analisado até uma distância de 20km. Este rio tem como características:

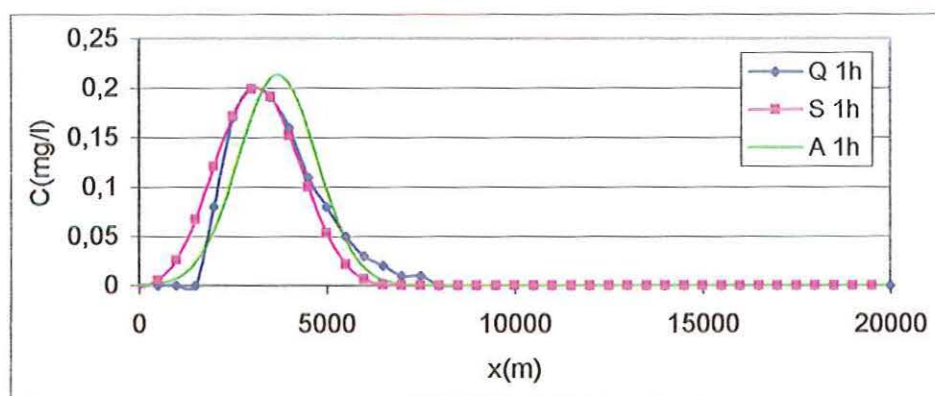
- Profundidade  $d= 0,3$  m;
- Largura do canal  $B= 12$  m;
- Área transversal  $A= 3,6$  m<sup>2</sup>;
- Vazão  $Q= 1,7$  m<sup>3</sup>/s;
- Velocidade  $U= 0,472$  m/s;
- Dispersão Longitudinal  $D_L= 150$  m<sup>2</sup>/s.
- Substância conservativa  $k= 0$ .

Inicialmente considerou-se que o curso d'água apresentava concentração da substância de 0 mg/l em todos os trechos do rio exceto na posição de 2km Para as

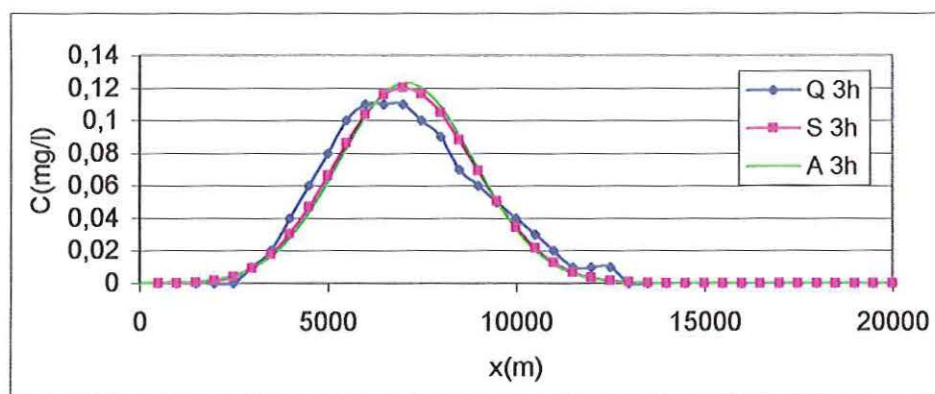
simulações com o uso dos programas QUAL2E e SAAM, foi considerado que devido à descarga de 2kg do poluente, gerou uma concentração de 1,111 mg/l (na posição de 2km). O trecho do rio de 20km de extensão foi dividido em 40 trechos de 0,5 km cada.

Os resultados não são afetados pela dispersão numérica devido aos métodos utilizados.

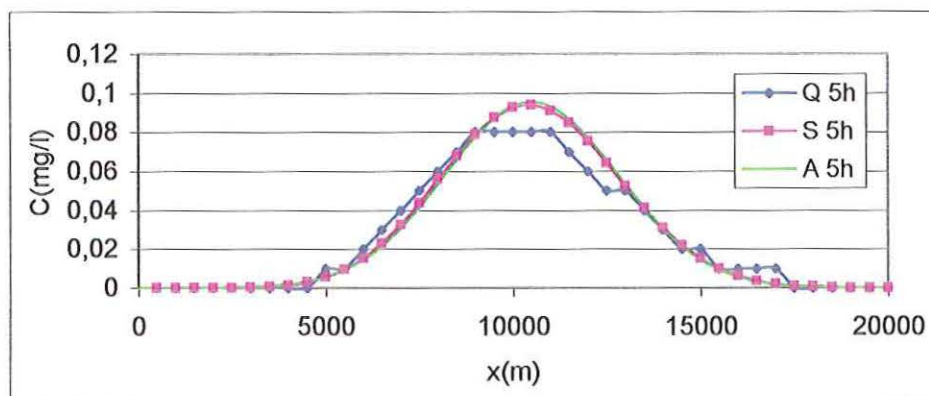
A seguir são mostrados os perfis de concentração da substância conservativa ao longo dos 20 km do curso d'água estudado em diversos instantes de tempo. Os gráficos são apresentados da mesma forma que o exemplo anterior.



**FIGURA 29-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 1 h – Caso6.



**FIGURA 30-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 3 h – Caso6.



**FIGURA 31-** Perfis de concentração da substância conservativa resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM em comparação com a solução analítica para um instante de tempo de 5 h – Caso6.

Os resultados produzidos pelos programas QUAL2E e SAAM (modificado) apresentaram pequenas diferenças quando comparados entre si e o resultado analítico. Nota-se que, em instantes de tempo subsequentes, o perfil de concentração resultante da simulação com o SAAM, torna-se mais aderente à solução numérica. Os resultados, em ambos os programas, podem ser considerados satisfatórios.

### Caso 7

Este caso trata-se de um rio hipotético, baseado no exemplo 12.1 do livro de Chapra, que recebe uma descarga instantânea de 100mg/l de DBO na posição de 0,5km a jusante de sua cabeceira. Foram analisados, para este caso, a concentração de OD e DBO em diversos instantes de tempo. A análise foi feita até uma distância de 3km. Este rio tem como características:

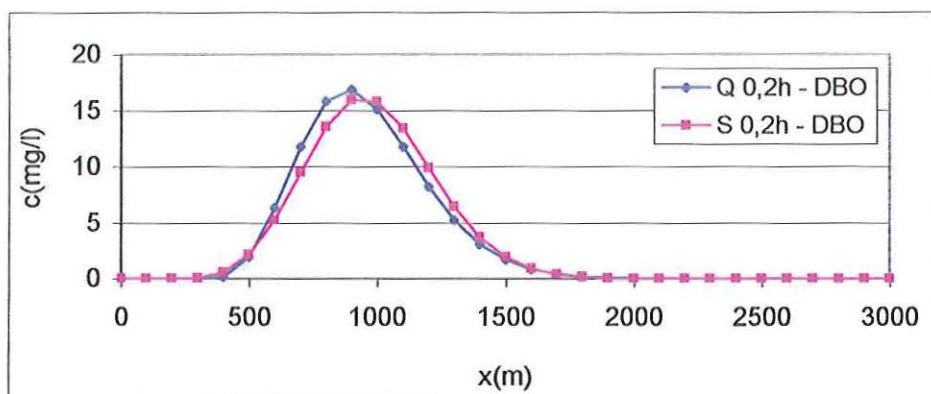
- Profundidade  $d=1$  m;
- Largura do canal  $B=60$  m;
- Área transversal  $A=60$  m<sup>2</sup>;
- Vazão  $Q=144000$  m<sup>3</sup>/h;
- Velocidade  $U=2400$  m/h;
- Dispersão Longitudinal  $D_L=150000$  m<sup>2</sup>/h;
- Coeficiente de Desoxigenação  $k_1=0,2$  dia<sup>-1</sup>;

- Coeficiente de Reaeração  $k_2 = 4,06 \text{ dia}^{-1}$ ;
- Coeficiente de Sedimentação da DBO  $k_3 = 0,3 \text{ dia}^{-1}$ ;
- Concentração de Saturação do Oxigênio  $C_s = 9,093 \text{ mg/l}$  (para uma temperatura de  $20^\circ\text{C}$ ).

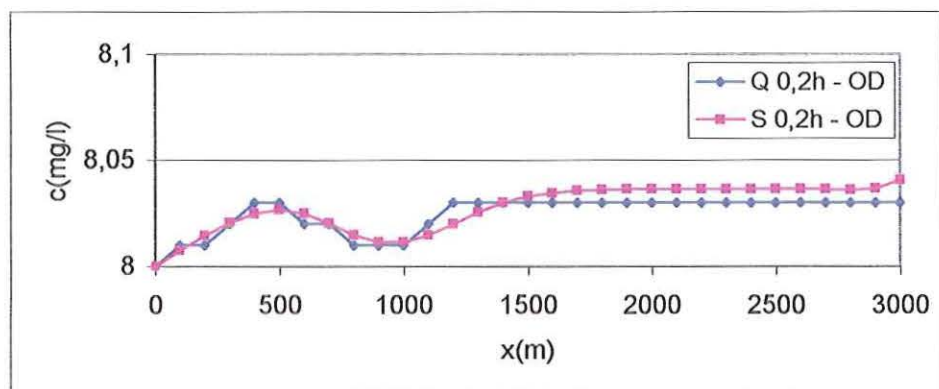
Inicialmente considerou-se que o curso d'água apresentava concentração da substância de  $0 \text{ mg/l}$  em todos os trechos do rio exceto na posição de  $0,5 \text{ km}$  ( $100 \text{ mg/l}$ ). O rio de  $3 \text{ km}$  de extensão foi dividido em 30 trechos de  $0,1 \text{ km}$  cada. Para este caso foram usados os programas QUAL2E e SAAM.

Os resultados não são afetados pela dispersão numérica devido aos métodos utilizados.

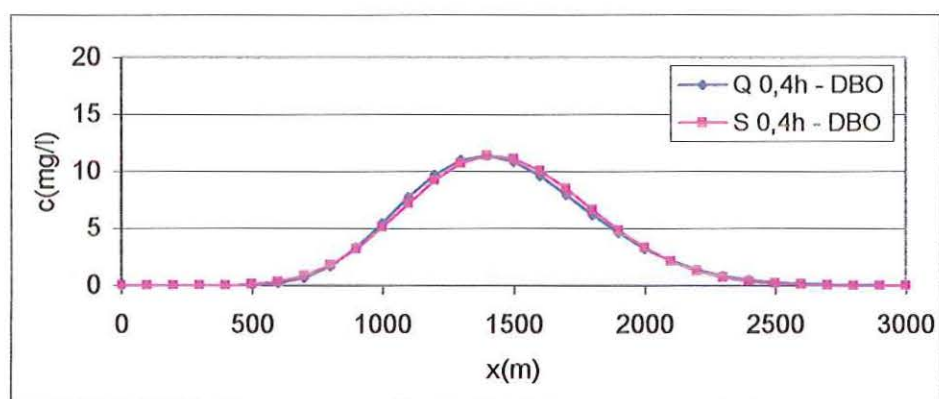
A seguir são mostrados os perfis de concentração de OD e DBO ao longo dos  $3 \text{ km}$  do curso d'água estudado em diversos instantes de tempo. Os gráficos são apresentados da mesma forma que o exemplo anterior, exceto resultado analítico.



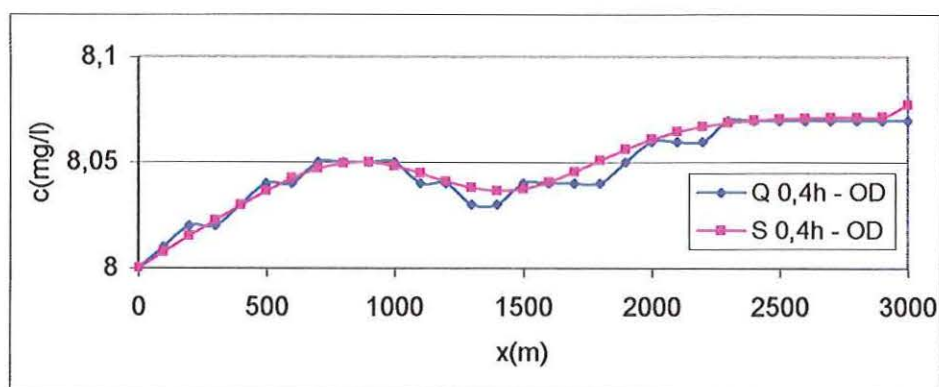
**FIGURA 32-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de  $0,2 \text{ h}$  – Caso7.



**FIGURA 33-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,2 h – Caso7.

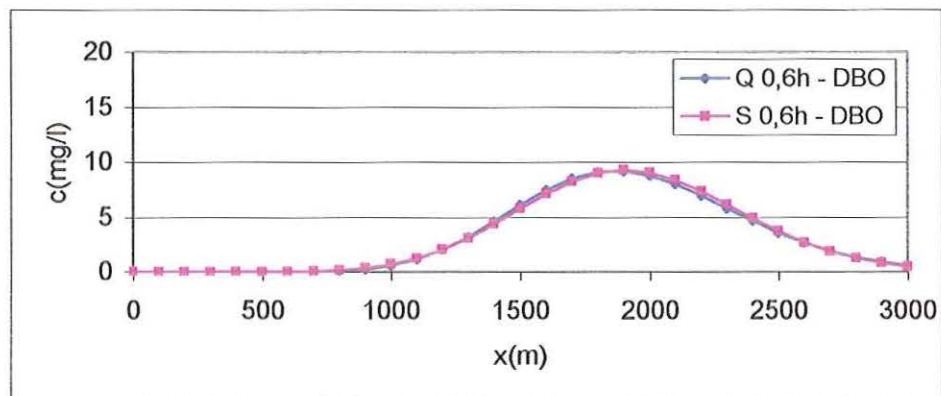


**FIGURA 34-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,4 h – Caso7.

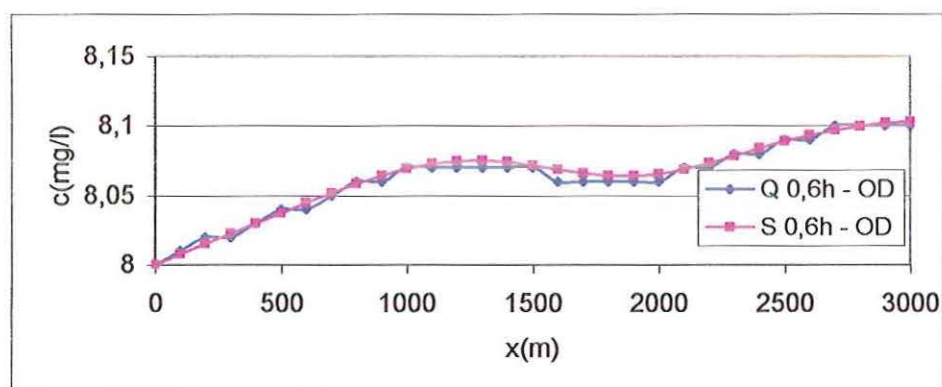


**FIGURA 35-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,4 h – Caso7.





**FIGURA 36-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,6 h – Caso7.



**FIGURA 37-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 0,6 h – Caso7.

Os resultados obtidos com o uso dos programas QUAL2E e SAAM (modificado) apresentaram diferenças insignificantes quando comparados entre si. Os resultados de OD obtidos em ambos programas podem ser considerados satisfatórios na medida em que seguem a tendência de curva esperada (para o caso de OD a concentração sofre uma queda em trechos onde houve crescimento de DBO e em seqüência volta a aumentar até atingir a sua concentração inicial). O desempenho do SAAM (modificado) pode ser considerado satisfatório.

### Caso 8

Este caso trata-se de um rio hipotético, que recebe uma descarga instantânea de 500mg/l de DBO na posição de 0,3km a jusante de sua cabeceira. Foram analisados, para este caso, a concentração de OD e DBO em diversos instantes de tempo. A análise foi feita até uma distância de 1km. Este rio tem como características:

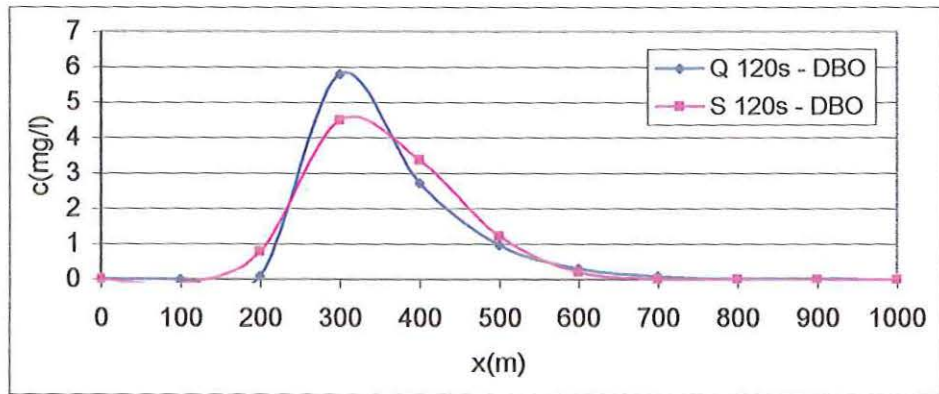
- Profundidade  $d= 2$  m;
- Largura do canal  $B= 20$  m;
- Área transversal  $A= 40$  m<sup>2</sup>;
- Vazão  $Q= 20$  m<sup>3</sup>/s;
- Velocidade  $U= 0,5$  m/s;
- Dispersão Longitudinal  $D_L= 30$  m<sup>2</sup>/s;
- Coeficiente de Desoxigenação  $k_1= 0,25$  dia<sup>-1</sup>;
- Coeficiente de Reaeração  $k_2= 1,05$  dia<sup>-1</sup>;
- Coeficiente de Sedimentação da DBO  $k_3= 0,34$  dia<sup>-1</sup>;
- Concentração de Saturação do Oxigênio  $C_s= 8,264$  mg/l (para uma temperatura de 25°C).

Inicialmente considerou-se que o curso d'água apresentava concentração da substância de 0 mg/l em todos os trechos do rio exceto na posição de 0,3km (500mg/l). O rio de 1km de extensão foi dividido em 10 trechos de 0,1 km cada. Para este caso foram usados os programas QUAL2E e SAAM.

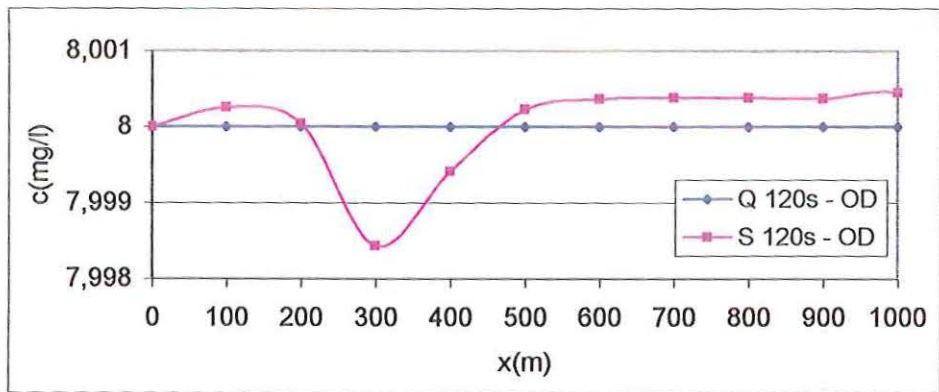
Os resultados não são afetados pela dispersão numérica devido aos métodos utilizados.

A seguir são mostrados os perfis de concentração de OD e DBO ao longo de 1km do curso d'água estudado em diversos instantes de tempo. Os gráficos são apresentados da mesma forma que o exemplo anterior, exceto resultado analítico.

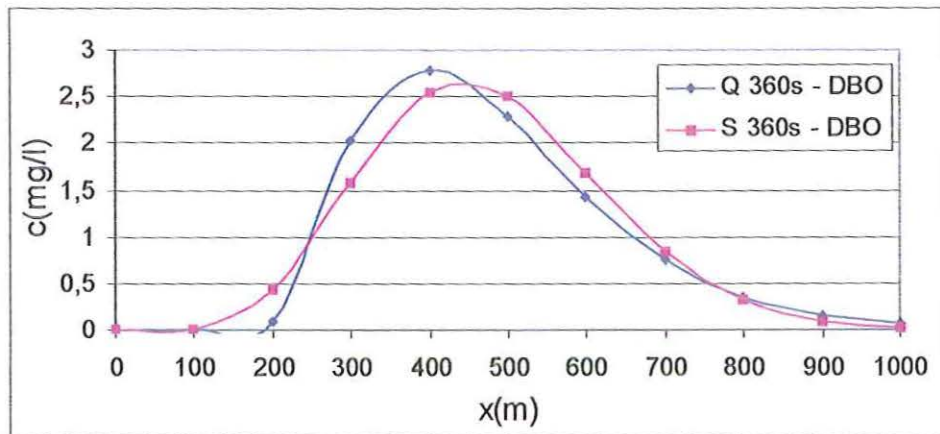




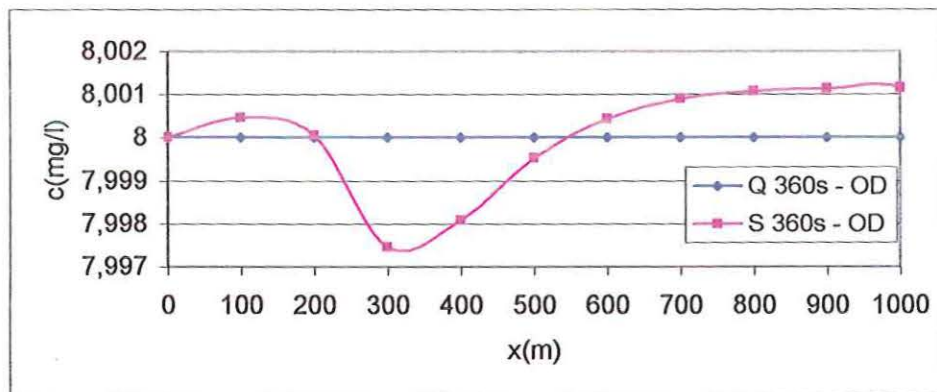
**FIGURA 38-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 120s– Caso8.



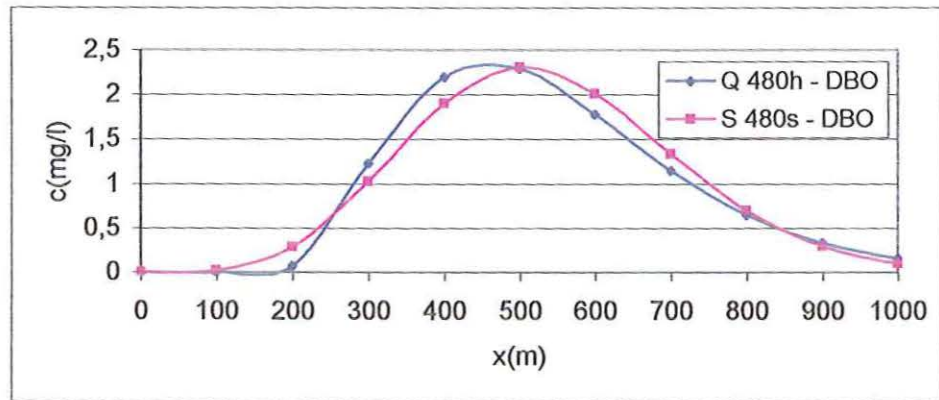
**FIGURA 39-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 120s – Caso8.



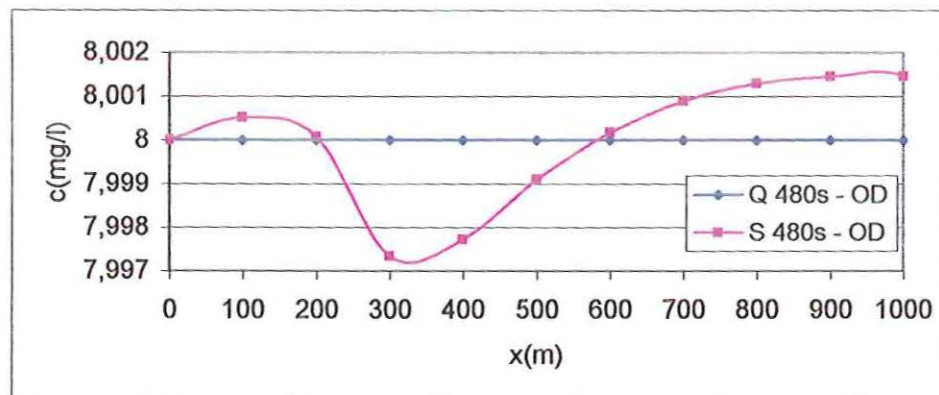
**FIGURA 40-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 360s– Caso8.



**FIGURA 41-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 360s– Caso8.



**FIGURA 42-** Comparação dos perfis de concentração de DBO resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 480s– Caso8.



**FIGURA 43-** Comparação dos perfis de concentração de OD resultante das simulações nos programas QUAL2E e SAAM para um instante de tempo de 480s– Caso8.

Os resultados obtidos com o uso dos programas QUAL2E e SAAM (modificado) apresentaram diferenças pouco significantes quando comparados entre si. É importante destacar que os resultados de OD seguiram a tendência de curva esperada (a concentração de OD sofre uma queda em trechos onde houve crescimento de DBO e em seqüência volta a aumentar até atingir a sua concentração inicial). Pode-se considerar como satisfatório o conjunto de resultados gerado pelo SAAM (modificado).

Vale ressaltar que os resultados produzidos pelo QUAL2E são restritos a duas casas decimais. Isto causa, em certos momentos, a impressão de grande diferença entre os resultados produzidos por este em relação aos produzidos pelo SAAM.

## 5- CONCLUSÕES E SUGESTÕES

---

### 5.1- CONCLUSÕES

Neste trabalho o modelo de qualidade de água QUAL2E foi adotado para a realização de simulações, em regime transiente, para a análise da capacidade de transporte de massa de poluentes conservativos e não conservativos em cursos d'água. Os resultados gerados nestas simulações foram comparados aos resultados da simulação pelo programa SAAM for Windows, com o uso da mesma equação unidimensional de transporte de massa por advecção e dispersão. As comparações entre os resultados obtidos pelos dois programas e também, pelos resultados obtidos analiticamente, indicaram diferenças preocupantes.

Por ser a implementação do SAAM objeto deste trabalho, e pelas diferenças encontradas nas comparações feitas com o objetivo de se avaliar a confiabilidade deste, verificou-se a necessidade de uma investigação mais aprofundada no que diz respeito à escolha do modelo e às formas de implementação e resolução do programa SAAM. Esta investigação fez parte da segunda etapa deste estudo onde foram estudados os métodos de resolução mais eficientes no que diz respeito à simulação de transportes de poluentes em cursos d'água. Foram estudados os diversos métodos disponíveis na literatura (Simple Implícito, Crank-Nicolson e MacCormack). Após este estudo optou-se por implementar o método de MacCormack no programa SAAM já que este produz melhores resultados quando comparado aos resultados analíticos além do fato de ser de programação mais fácil.

O programa computacional SAAM foi atualizado para a versão 6.0 da linguagem de programação *Visual Basic* e possui agora diversas inovações em relação à primeira versão. Entre elas: sistemática de busca, edição e criação de fórmulas melhorada, funções de logaritmo em diversas bases e logaritmo neperiano, além da

principal inovação o uso do Método de MacCormack para simulação de transporte de substâncias conservativas e não conservativas em cursos d'água. O SAAM conta ainda, com a ferramenta de avaliação da concentração de OD (de forma simplificada) e DBO.

Durante a primeira fase de implementação do SAAM, para o primeiro caso estudado, verificou-se que foi necessário adicionar trinta equações (de forma igual, diferindo apenas de seus índices) e interligá-las manualmente uma a uma. Na fase final deste trabalho foi resolvido este inconveniente para o Método de MacCormack onde se julgou ser mais necessário devido ao fato de se dividir rios (ou canais) em muitos trechos, e isto determina diretamente o número de equações. A este processo deu-se o nome de 'automatização'.

Com a automatização, o usuário conta agora com a opção de informar ao programa (na janela de condições iniciais de simulação quando aplicado o Método de MacCormack) de quantos trechos irá necessitar e o programa preenche automaticamente internamente as operações solicitadas já interligadas.

Em resumo, podem ser destacadas conclusões importantes:

- O programa SAAM possui agora a capacidade de simular o transporte de substâncias conservativas e não conservativas em cursos d'água, em casos de derramamento instantâneo, através do método de resolução de MacCormack. Assim sendo contribui com informações para a fase de planejamento de estudos de qualidade de água, como também, fornecendo dados para coordenação de ações de combate dos efeitos causados pela ação de fontes poluidoras buscando minimizá-los;
- O programa SAAM pode ser usado para qualquer área do conhecimento onde são usadas equações interdependentes entre si que variem no tempo, espaço ou em outra variável;
- Os exemplos que foram apresentados neste trabalho foram testados e comparados com resultados analíticos, com resultados da utilização do programa QUAL2E e também, com resultados da literatura na medida do possível. As diferenças entre tais resultados, na sua maioria, não foram tão significativas. Desta forma, pode-se considerar que a implementação realizada no SAAM (Método de MacCormack e funções de OD e DBO) foi bastante satisfatória e que o trabalho obteve sucesso.

## 5.2- SUGESTÕES

Este trabalho teve como objetivo acrescentar ao programa computacional SAAM for Windows a capacidade de simular o transporte de poluentes em cursos d'água com facilidade de manipulação. Seguem algumas sugestões para que o programa seja atualizado e possa cada vez mais ser utilizado:

- Divulgação e a disponibilização do SAAM para pesquisadores que trabalhem em áreas correlatas ao trabalho que foi apresentado, como também, em diversas outras áreas do conhecimento;
- Continuidade deste trabalho como forma de adicionar novas ferramentas e contribuir com melhorias.

Problemas com o SAAM e sugestões podem ser comunicados via correio eletrônico para o endereço: [andlusi@bol.com.br](mailto:andlusi@bol.com.br)



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

BROWN, L. C.; BARNWELL JR., T. O. (1987). *The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS – Documentation and User Manual*. EPA 600/3-87/007. Athens, GA, U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY.

CHAPRA, S. C. (1997). *Surface water- quality modeling*. New York, McGraw-Hill.

EVORA, J. E. M. (1999). *Desenvolvimento do programa SAAM for Windows para simulação de processos de engenharia sanitária e ambiental*. São Carlos. 61p. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

FRANKS, R.G.E.(1972). *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*. New York, Wiley – Interscience.

GIORGETTI, M. F. (1998). *Introdução aos Métodos Numéricos*. Notas de aula, Departamento de Hidráulica e Saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

HARLEMAN, D. R. F. (1975). *Transport processes in water quality control*. Notes, Massachusetts Institute of Technology Department of Civil Engineering, USA.

LIMA, C.A.A. (1997). *O uso do modelo Qual2e na simulação da qualidade das águas do rio Jacaré-Guaçu*. São Carlos. 179p. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

MENDES, C.B.S.T.; LORETO, D. F. (1997). *Estudo da capacidade de autodepuração de cursos de água naturais da Bacia do Ribeirão do Carmo (Ouro Preto – MG) com o uso de modelo de qualidade da água*. Ouro Preto. 67p. Relatório de Iniciação Científica – Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto.

SILVA, A. L. (1999). *Dispersão longitudinal de substâncias conservativas em cursos d'água naturais*. Ouro Preto. 84p. Relatório de Iniciação Científica – Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto.

VON SPERLING, M. (1995). *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos. Princípios do tratamento biológico de águas residuárias*. Vol. 1. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais.

**APÊNDICE A - Apostila do programa computacional SAAM..**

*Apostila do programa*

*SAAM for Windows*

Andréa Luiza da Silva

## SUMÁRIO

|   |    |
|---|----|
| 1- INTRODUÇÃO .....                         | 1  |
| 2- INSTRUÇÕES DE COMO UTILIZAR O SAAM ..... | 2  |
| 2.1 – Janela Fluxograma .....               | 3  |
| 2.2 – Janela Condições de Simulação .....   | 6  |
| 2.3 – Janela Resultados .....               | 7  |
| 2.4 – Criando blocos .....                  | 8  |
| 2.5 – Instalação do programa SAAM .....     | 10 |
| 3- EXEMPLOS.....                            | 10 |
| 3.1- Exemplo 1 .....                        | 10 |
| 3.2- Exemplo 2 .....                        | 17 |
| 4- CONSIDERAÇÕES FINAIS.....                | 21 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....            | 22 |

## 1- APRESENTAÇÃO

Este programa computacional foi desenvolvido pelo Eng. José Eduardo Matheus Évora, como tema de mestrado (1999), para a simulação de processos de engenharia sanitária e ambiental.

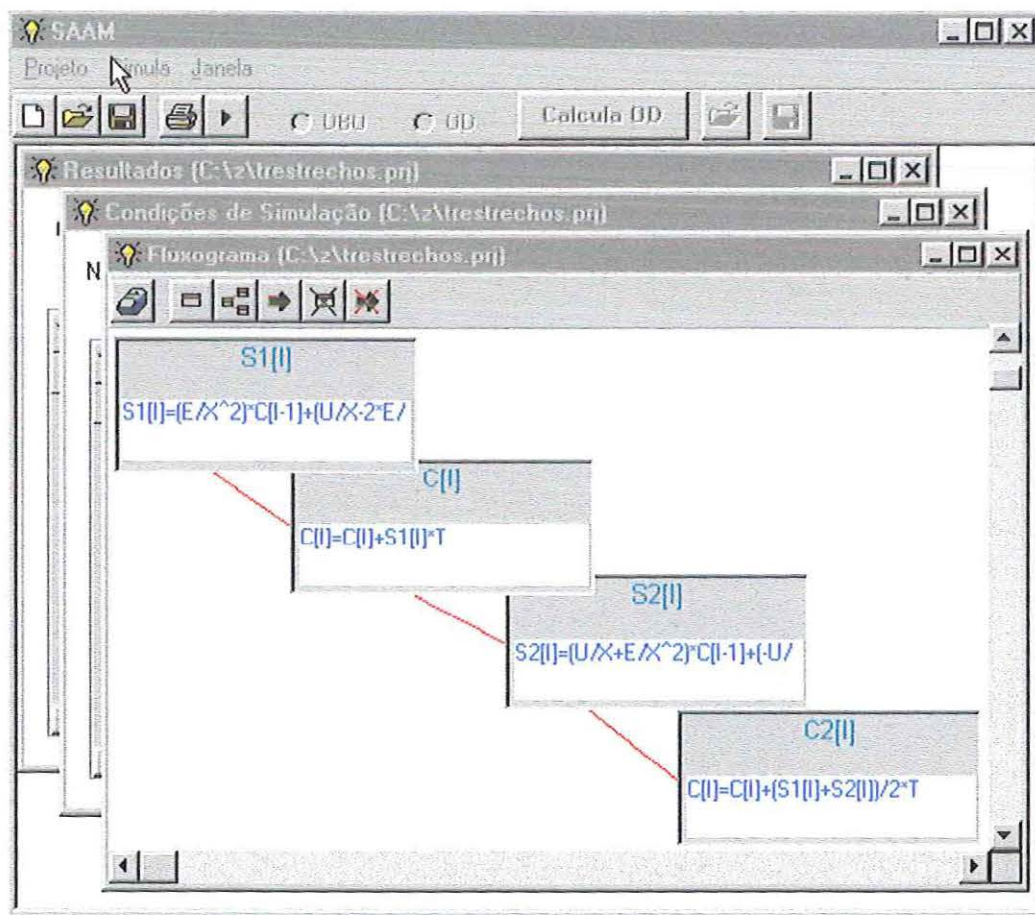
O SAAM resolve sistemas constituídos por blocos (como em um diagrama de blocos para programas de computação – fluxogramas) que representam etapas de um processo inspirado na metodologia desenvolvida por Franks (1972). Cada bloco representa uma operação, e o usuário pode usar blocos pré-existentes ou criar novos. No diagrama de blocos, podem se interligar diferentes operações dependentes entre si para se obter os resultados das variáveis de interesse, desde que o número de equações independentes ou fontes de informação seja igual ao número das incógnitas.

Em sua nova versão, o SAAM foi implementado com a capacidade geral relativa à simulação do transporte de poluentes em cursos d'água. Originalmente o programa SAAM foi desenvolvido para a simulação de conjuntos discretos, mas agora ele foi adaptado para a simulação de sistemas contínuos. Os métodos utilizados para a resolução dos sistemas de operações montados no programa são: o método numérico de Runge-Kutta de terceira e quarta ordens, o Método de MacCormack para transporte de poluentes e as funções para cálculo de concentração de DBO e OD (simplificado). O regime de simulação adotado é o não permanente.

O programa computacional SAAM foi atualizado para a versão 6.0 da linguagem de programação *Visual Basic* e possui agora diversas inovações em relação à primeira versão. Entre elas: sistemática de busca, edição e criação de fórmulas melhorada, funções de logaritmo em diversas bases e logaritmo neperiano, além da principal inovação, recursos para a simulação de transporte de substâncias conservativas e não conservativas em cursos d'água.

## 2- INSTRUÇÕES DE COMO UTILIZAR O SAAM

Ao executar o programa, o usuário visualiza uma tela principal com três janelas internas, correspondentes às *condições de simulação*, ao *fluxograma* e aos *resultados*. A primeira janela, “*fluxograma*”, é o local onde o usuário cria o sistema constituído por blocos. A segunda, “*condições de simulação*”, corresponde à entrada das condições iniciais. A terceira janela, “*resultados*”, local onde são exibidos os resultados da simulação, que serão vistos na forma de tabela ou na forma de gráfico. A seguir pode ser visualizada a tela principal do SAAM com suas janelas internas.



**FIGURA 01** – Tela Principal do SAAM for Windows

O programa SAAM possui telas que seguem os padrões de qualquer aplicativo (programa) em base *Windows*.

A tela principal, como mostrada na fig.(01) é facilmente manipulada. Esta possui uma barra de menus: *Projeto*, *Simula* e *Janela* que segue o padrão da *Windows* de menus.

Escolhendo o item *Projeto* o usuário terá como opções: *Novo*, *Abrir*, *Salvar*, *Salvar como*, *Imprimir* e *Sair*. Estas opções permitem ao usuário manipular os arquivos de projeto. Os projetos criados no programa SAAM são arquivos texto com extensão “.PRJ” .

O item *Simula*, como o próprio nome diz, realiza a simulação do projeto criado pelo usuário. Este item somente funciona se o usuário corretamente: montar todo o seu sistema de blocos na janela *Fluxograma* (colocação de blocos na seqüência de operação); preencher a grade de condições de simulação; preencher e selecionar as variáveis a serem mostradas na grade de *Resultados* (da mesma forma que aparecem na fórmula interna dos blocos em uso).

No item *Janela* encontra-se as seguintes opções: *Cascata*, *Lado a Lado*, *Fluxograma*, *Condições de Simulação* e *Resultados*. Quando o usuário seleciona a função de cálculo de OD abre-se mais duas janelas e conseqüentemente aparecem as funções *Resultados – OD* e *Condições de Simulação – OD*. Estas opções permitem ao usuário manipular as janelas do programa.

## 2.1 – Janela Fluxograma

Nesta janela, o usuário tem acesso aos arquivos dos blocos e é onde são montados os sistemas de blocos a ser simulado. Para isto utiliza-se os botões de comando seguintes:



Botão *Arquivo* – usado para adicionar, alterar, procura e testar blocos.



Botão *Cria Blocos* – usado para inserir um bloco sem ligação.



Botão *Liga Blocos* – usado para inserir um bloco com ligação a partir do bloco que está ativado.



Botão *Liga Bloco* – usado para fazer ligação entre blocos.



Botão *Exclui Bloco* – usado para apagar bloco.





Botão Exclui ligação - usado para apagar uma ligação entre blocos.

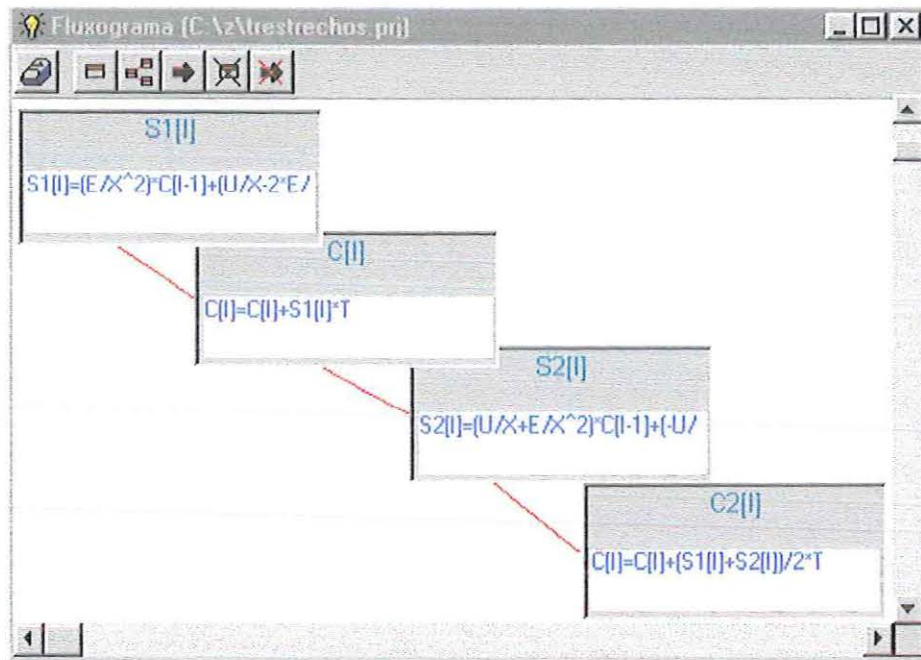


FIGURA 02 – Janela Fluxograma

Para trocar a fórmula de algum bloco, o usuário deverá pressionar o botão *Arquivo* e uma janela secundária chamada *Fórmula* irá se abrir, como mostrado na fig.(03). Na parte inferior desta janela aparece uma lista de fórmulas onde o usuário deverá selecionar outra fórmula e logo depois pressionar o botão *Fechar*.

A janela *Fórmula* possui muitos outros recursos. Estes recursos são acessados pelos botões: *Fechar*, *Apagar*, *Voltar*, *Adicionar*, *Atualizar*, *Pesquisa* e *Testar*. As funções de cada botão são as seguintes: acionando o botão *Fechar*, fecha-se a janela de bloco; o botão *Apagar*, apaga-se o bloco que está aparecendo na tela; o botão *Voltar*, permite que o usuário desfça a última alteração efetuada; o botão *Adicionar*, adiciona-se um novo bloco no arquivo; o botão *Atualizar*, organiza-se o arquivo em ordem alfabética; no botão *Pesquisa*, permite pesquisar blocos digitando-se as iniciais ou o nome do bloco, o número do código de localização ou mesmo, as iniciais da fórmula do bloco de interesse (acionando o botão *Pesquisa* é possível também, editar a fórmula do bloco); o botão *Testar*, abre-se uma nova tela, para entrar com os valores numéricos das variáveis de entrada e para calcular o valor da variável de saída.

OBS.: Ao se utilizar o botão *Pesquisa* para trocar um bloco ativo, após ter encontrado o bloco procurado, deve-se dar um duplo clique no nome do bloco e acionar o botão *Fechar*.

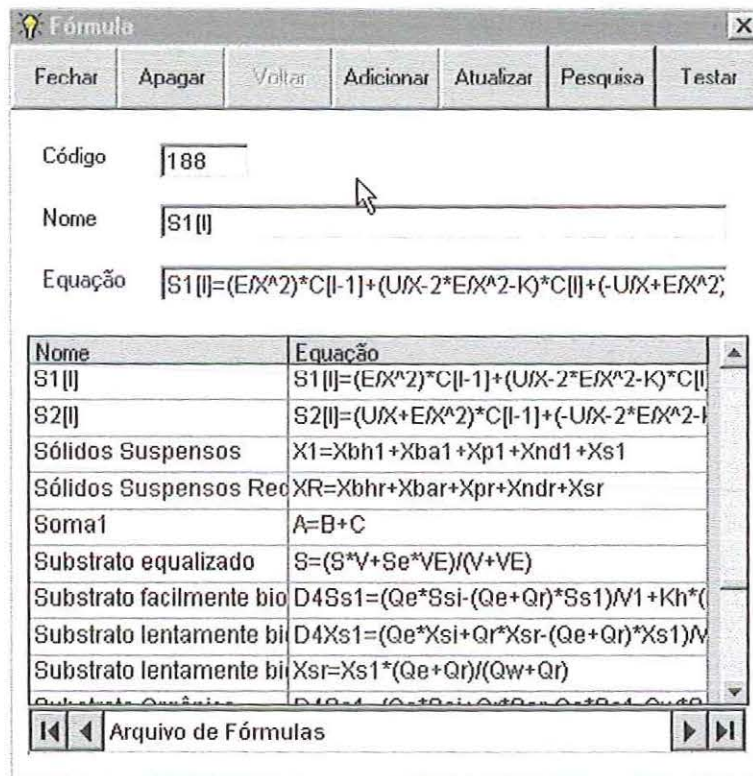


FIGURA 03 – Janela *Fórmula*

Para movimentar um bloco o usuário deve pressionar com o botão direito sobre o mesmo e permanecer pressionado levando o para onde desejar. Para visualizar algum bloco que não apareça na tela, o usuário deverá utilizar as barras de rolagem na parte inferior da janela *Fluxograma*.

## 2.2 – Janela Condições de Simulação

Nesta janela, o usuário deve fornecer as condições iniciais e as de simulação para o sistema de blocos a ser simulado. O usuário deve fornecer o nome da variável independente e a quantidade de trechos (para o uso das funções D3 e D4 (Runge Kutta de terceira e quarta ordens) como na versão anterior, a quantidade de trechos significa intervalos da variável independente onde os valores das variáveis das fórmulas podem mudar de valor e; para o caso do uso do Método de MacCormack, funções de OD e DBO, esta quantidade de trechos significa em quantas partes (trechos) o curso d'água será dividido). Além disto o usuário deverá informar na grade os valores das variáveis presentes nas fórmulas e deixar em branco as que deverão ser calculadas.

Como mostrado na fig.(04) a seguir, a grade é montada, além do início, fim e intervalo dos trechos, com as variáveis dos blocos do fluxograma.

| Trecho | Início | Fim | Intervalo | C[0] | C[1] | C[2] | C[3] | C[4] |
|--------|--------|-----|-----------|------|------|------|------|------|
| 1      | 0      | 0,2 | 0,1       | 0    | 0    | 0,5  | 0    | 0    |

**FIGURA 04** – Janela *Condições de Simulação*

Para o preenchimento da grade o usuário deverá clicar duas vezes com o botão esquerdo do mouse no item a ser preenchido e, para preencher em seqüência poderá usar o botão ENTER do teclado até o fim para fixar os valores.

OBS.: Os valores inseridos na grade de *Condições de Simulação* devem estar em unidades compatíveis. Recomenda-se uma análise prévia destas unidades.

### 2.3 – Janela Resultados

Nesta janela, o usuário terá acesso aos resultados das que desejar. Para isto deve-se entrar com a quantidade de variáveis que serão mostradas no quadro de texto na parte superior da janela e depois digitar o nome das variáveis na tabela (antes da simulação).

Para efetuar a digitação das variáveis na grade deve-se proceder da seguinte forma: dar um clique duplo na primeira coluna a ser informada o nome da variável que vai ser mostrada e seguir preenchendo usando a tecla ENTER do teclado, não se esquecendo de que a variável deve corresponder exatamente a como ela foi criada nos blocos (maiúsculas, minúsculas e caracteres originais). Cada coluna da grade de *Resultados* corresponde a uma variável.

Para utilizar a função de geração de gráfico de algumas variáveis, ou todas em conjunto basta clicar duas vezes sobre a variável de interesse até aparecer o símbolo “<G>” ao lado e para desfazer esta função, basta repetir o duplo clique.

Para salvar os resultados em um arquivo texto (.dat) basta apertar o botão *Exportar Resultado*. Esta função permite que os resultados possam ser abertos em editores de texto ou em planilhas de cálculos (por exemplo, Excel) facilitando a criação de gráficos mais elaborados, isto porque o Visual Basic possui poucos recursos.

Os botões de acesso aos recursos citados acima estão listados a seguir:



Botão *Gera Gráfico* - usado para visualizar o gráfico.

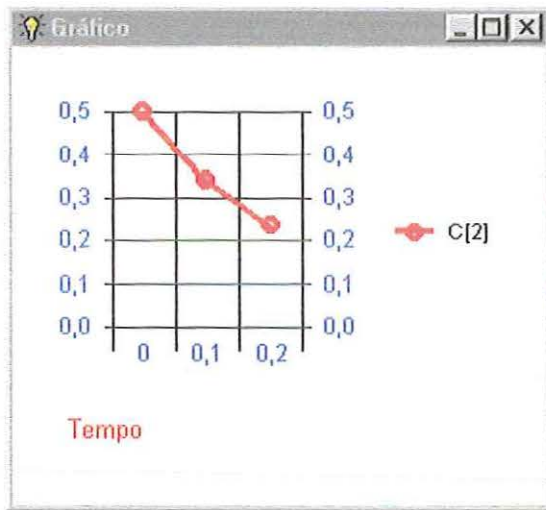


Botão *Exporta Resultado* – usado para salvar os resultados em arquivo texto (extensão .DAT) podendo ser usado em planilhas ou editores de texto.

| Tempo | C[0] | C[1]      | C[2]<G>   | C[3]      | C[4] |
|-------|------|-----------|-----------|-----------|------|
| 0     | 0    | 0         | 0,5       | 0         | 0    |
| 0,1   | 0    | 0,0380468 | 0,3387083 | 0,0430363 | 0    |
| 0,2   | 0    | 5,1563451 | 0,2359962 | 5,8288436 | 0    |

FIGURA 05 – Janela *Resultados*

Para visualizar o gráfico basta clicar o botão *Gera Gráfico* desde que o usuário clique sobre alguma variável que possua o símbolo “<G>” anteriormente. Observe a fig.(06) a seguir.



**FIGURA 06** – Janela *Gráfico*

A janela *Gráfico* só é visualizada depois que pelo menos uma simulação do modelo tenha sido realizada. É importante ressaltar que esta janela serve apenas como auxiliar na visualização dos resultados, pois este trabalho não teve como objetivo se tornar uma ferramenta poderosa de desenvolvimento de gráficos, tal como o Excel. Porém, a opção de salvar os resultados em arquivos textos é um recurso importante, como foi citado anteriormente, para que o usuário gere gráficos mais elaborados em outro programa, ou mesmo, tabelas em programas de texto.

## 2.4 – Criando blocos

As fórmulas inseridas nos blocos são em formato texto. O programa SAAM possui um compilador matemático para interpretar as equações matemáticas. Este foi desenvolvido para reconhecer os operadores de soma (+), subtração(-), multiplicação (\*), divisão(/), potenciação (^), a função matemática de exponencial ( EXP(variável ou número)) e as funções LOG(número ou função, base) e LN(número ou função).

Como foi explicado por em Évora(1999), quando for necessário utilizar-se de equação diferencial, o usuário deve informar de maneira que o programa entenda o que se pretende. Usando o mesmo exemplo apresentado por Évora(1999) têm-se uma equação diferencial do tipo:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{(Q_o - Q)}{A} \quad (\text{Taxa de Acumulação de Volume}) \quad (01)$$

Para que o programa interprete corretamente, deve-se escolher qual o método de resolução desejado (Runge-Kutta de quarta ou terceira ordem). A indicação de uma equação diferencial solucionada pelos métodos de Runge-Kutta na fórmula de um bloco inicia-se com os caracteres D4 ou D3, respectivamente para quarta ou terceira ordem. Adotando-se o método de Runge-Kutta de quarta ordem, a equação fica:

$$D4V = (Q_o - Q)/A \quad (2)$$

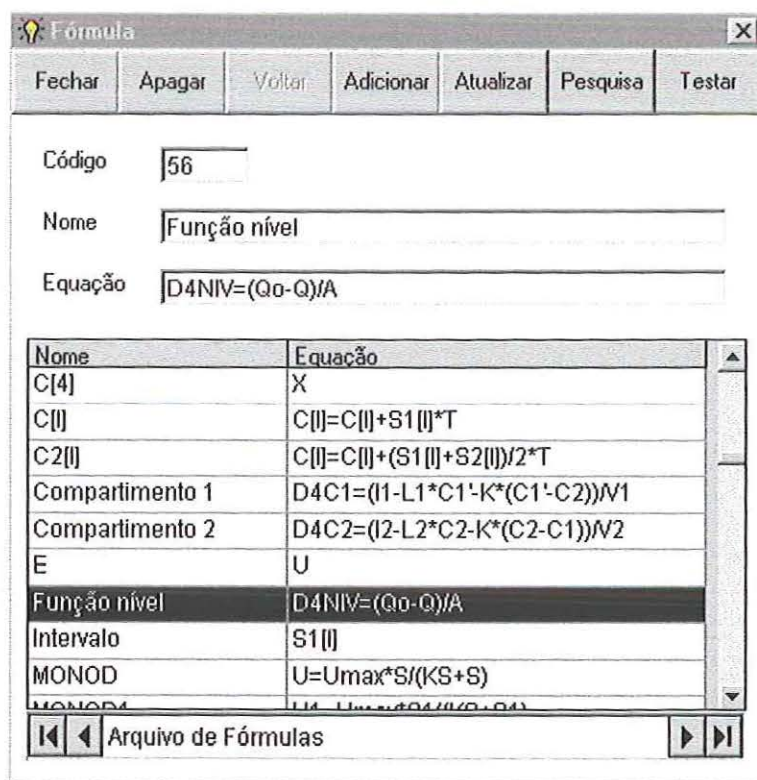


FIGURA 07 – Exemplo de como criar uma equação diferencial no SAAM

## 2.5 – Instalação do programa SAAM

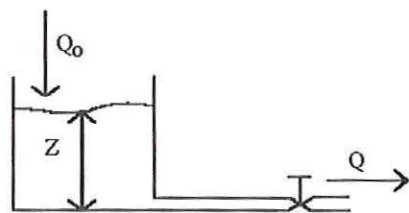
Para instalar o SAAM Versão 2.0, quer dizer, o programa modificado, o usuário deve se utilizar do instalador presente no CD anexado neste trabalho. Neste CD estão presentes todas informações necessárias para a instalação no arquivo de texto “instruções.txt”.

## 3 – EXEMPLOS

A seguir são mostrados dois exemplos de utilização do programa SAAM Versão 2.0. O primeiro é um exemplo apresentado por Évora(1999) e o segundo o Caso I apresentado nesta dissertação. Os modelos matemáticos dos exemplos citados são simples, a fim de facilitar a utilização do programa SAAM para quaisquer outros casos. Vale ressaltar que os exemplos aqui apresentados servirão de base para a correta utilização do programa. Os demais casos apresentados nesta dissertação constam no CD em anexo.

### 3.1- Exemplo 1 - Tanque de nível variável (Évora(1999))

Este exemplo baseia-se em um tanque com água entrando com uma vazão conhecida  $Q_0$  e uma vazão de saída  $Q$ , que é função do nível do tanque e constante da válvula. O modelo busca determinar o nível  $Z$  da água no tanque em um determinado instante  $t$ , conforme mostra a fig.(08).



**FIGURA 08** – Tanque com descarga contínua

A equação de conservação de massa para a análise do sistema pode ser apresentada da seguinte forma:

$$\text{Taxa de Acumulação} = \text{Descarga de Entrada} - \text{Descarga de Saída} \quad (1)$$

donde:

$$\frac{dV}{dt} = Q_o - Q \quad (2)$$

sendo

$$\frac{dV}{dt} = \text{Taxa de Acumulação Volumétrica (L}^3 \text{T}^{-1}\text{)}$$

$$Q_o = \text{Vazão Afluente (L}^3 \text{T}^{-1}\text{)}$$

$$Q = \text{Vazão Efluente (L}^3 \text{T}^{-1}\text{)}$$

Sendo a área da seção transversal simbolizada por  $A$ , o volume será  $ZA$ , e a expressão  $dV/dt$  pode ser substituída por  $d(ZA)/dt$ . Porém, considerando a área  $A$  como constante, a expressão pode ser reescrita como  $AdZ/dt$ .

A vazão efluente pode ser expressa segundo:

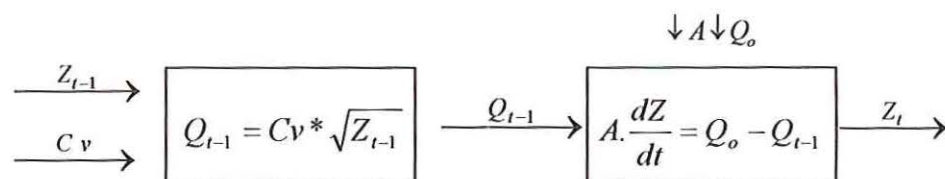
$$Q = C_v * \sqrt{Z} \quad (3)$$

os termos da expressão acima significam:

$C_v$  = Constante da Válvula

$Z$  = Nível da Água no Tanque (L)

A informação para o sistema pode ser visualizada na forma de diagrama de blocos, segundo a metodologia desenvolvida por Franks(1972), como mostrado na fig.(09) a seguir.



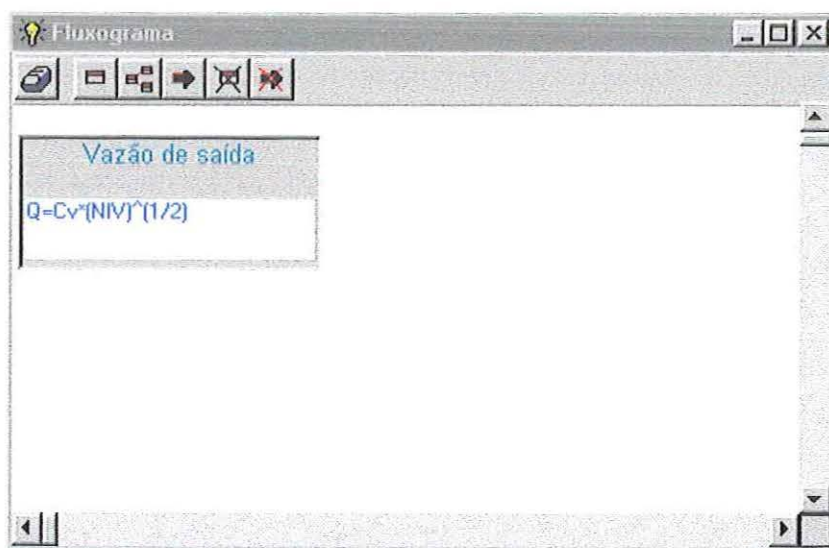
**FIGURA 09** – Diagrama de blocos simplificado do modelo matemático para o tanque com descarga contínua



A partir do diagrama acima, o programa SAAM será utilizado para desenvolver a simulação matemática do modelo descrito. O usuário deverá seguir os seguintes passos: entrar com os dados dos blocos e do fluxograma, entrar com as condições de simulação, entrar com as variáveis que deseja saber o resultado. O detalhamento destes passos será apresentado a seguir.

O usuário ao inicializar o programa SAAM, visualizará a janela *Fluxograma* ativada com um bloco no canto superior esquerdo. Este deverá ser posicionado onde for desejado, como explicado anteriormente. Após efetuar o posicionamento do bloco, deverá ser digitada a fórmula do bloco no caso do mesmo não existir, ou utilizar-se do bloco existente. Para isto o usuário deverá clicar no botão *Arquivo* e utilizar-se das operações explicadas no item 2.1.

Para inserir um novo bloco, basta apertar o botão *Cria Bloco* e alterá-las na janela *Fórmula*. As equações devem ser adaptadas para que o programa possa interpretar corretamente as equações matemáticas. Sendo assim o primeiro bloco fica como mostrado na fig.(10).

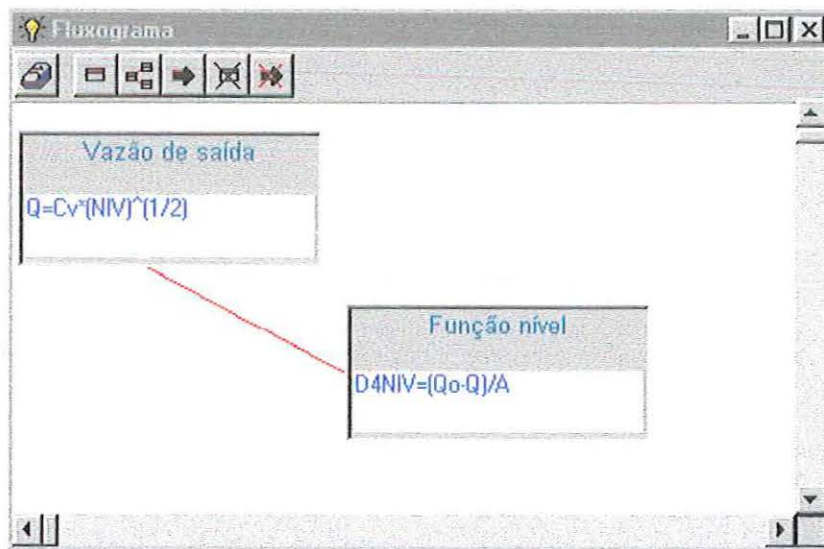


**FIGURA 10** – Janela *Fluxograma* como o primeiro bloco do exemplo.

Seguindo o diagrama da fig.(09), o próximo passo será inserir um novo bloco com ligação ao primeiro bloco. Isto demonstra a interdependência de ambos os blocos. A inserção é feita através do acionamento do botão de *Liga Blocos*, este é inserido e posicionado no canto superior esquerdo.

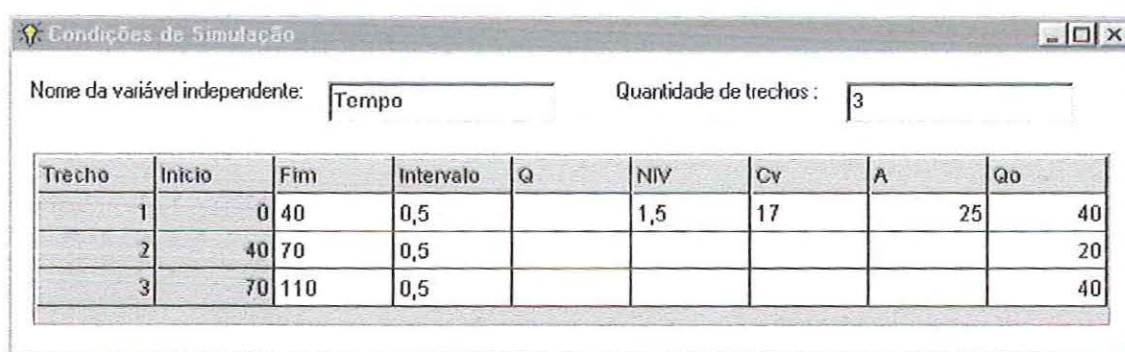
**FIGURA 11** – Botão *Liga Blocos*

Novamente o usuário moverá o bloco para onde desejar e executar o procedimento de inserção dos dados do segundo bloco do diagrama, fig.(09), na janela *Fórmula* acionada pelo botão *Arquivo* da mesma maneira que o primeiro bloco. Vale lembrar que a equação inserida é uma diferencial e método adotado é o Runge-Kutta de quarta ordem, então é importante fazer a adaptação, conforme o item 2.4. Concluído estes procedimentos, o fluxograma completo fica como a figura a seguir.

**FIGURA 12** – Fluxograma para o tanque com descarga contínua

Após o término do fluxograma, o usuário deve alternar para a janela de *Condições de Simulação*. Esta janela tem como função a definição das condições de simulação, ou seja, as informações necessárias para que a simulação ocorra. Dentre essas, estão as condições iniciais e de contorno que são fundamentais para o bom funcionamento da simulação.

Ao ativar a janela de *Condições de Simulação*, o programa SAAM exibe na planilha todas as variáveis existentes no processo, evitando assim, a possibilidade do esquecimento de alguma variável. Além da planilha, existem dois campos para entrada do nome da variável independente e da quantidade de trechos. No caso em estudo, a variável independente é o tempo e a quantidade de trechos é três, pois nos primeiros 40 minutos a vazão de entrada é de  $40 \text{ m}^3/\text{min}$ , nos 30 minutos seguintes a vazão de entrada é reduzida a metade e no tempo restante a vazão de entrada volta à inicial. Com isso a janela fica conforme fig.(13).





| Trecho | Inicio | Fim | Intervalo | Q | NIV | Cv | A  | Qo |
|--------|--------|-----|-----------|---|-----|----|----|----|
| 1      | 0      | 40  | 0,5       |   | 1,5 | 17 | 25 | 40 |
| 2      | 40     | 70  | 0,5       |   |     |    |    | 20 |
| 3      | 70     | 110 | 0,5       |   |     |    |    | 40 |

**FIGURA 13** – Condições de Simulação para o tanque com descarga contínua

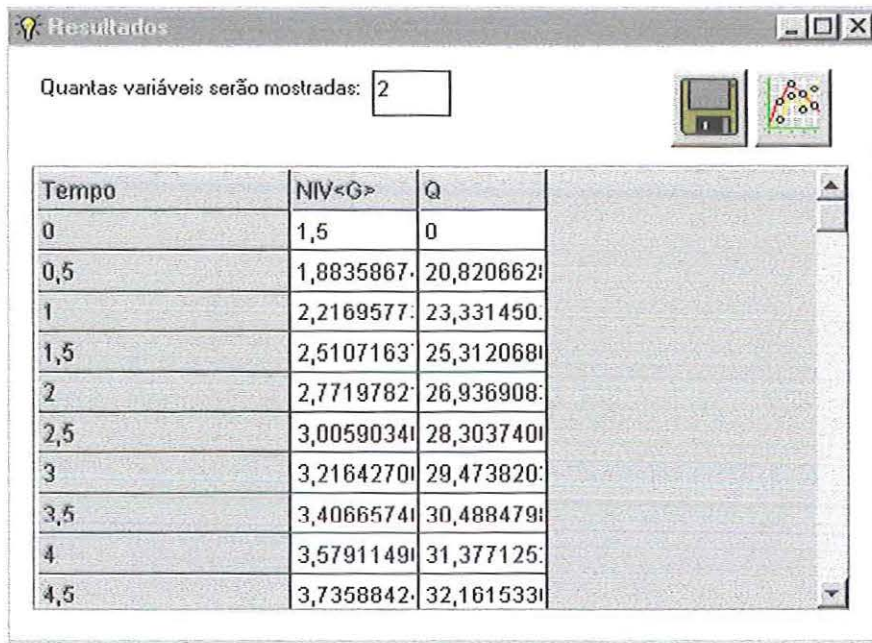
O nível inicial no tanque é  $1,5 \text{ m}$ , a constante da válvula é  $17$  e área do tanque é  $25 \text{ m}^2$ , com isso as condições iniciais estão estabelecidas. O intervalo é um dos pontos mais importantes da simulação, pois é ele que define a precisão do resultado e o esforço computacional. O usuário deve definir um valor que não seja muito grande, que gere instabilidade no método numérico, e nem muito pequeno, que exija muito esforço computacional, pois dependendo da complexidade dos modelos pode significar muitos minutos de simulação. No exemplo em questão, foi adotado o valor de  $0,5$ , pois com este intervalo não gerou instabilidade nos resultados, fornecendo resultados precisos e não demandou um grande esforço computacional.

Após a definição das condições, o usuário deve ativar a janela dos *Resultados*. Nesta janela serão apresentados os resultados das variáveis determinadas, para isso deve-se, primeiro, definir a quantidade de variáveis que serão mostradas no campo indicado para tal. Depois para digitar os nomes das variáveis, basta que se selecione (com um clique duplo) uma coluna e digitar normalmente os nomes. No exemplo do tanque com descarga contínua, foram escolhidas duas variáveis: Q e NIV, pois são as duas que tem os valores calculados pela simulação. O usuário poderá definir, tanto antes quanto depois da simulação, os gráficos das variáveis que desejar. Para isto, basta dar um clique duplo nas células das mesmas e aparecerá um símbolo “<G>” ao lado da mesma, conforme explicado no item 2.3.

Com todas as grades preenchidas deve-se salvar o arquivo do projeto. O procedimento para salvar o projeto é igual a qualquer procedimento de aplicativos em o ambiente Windows. Existem duas opções para salvar, uma é pelo menu da janela principal, selecionando menu *Projeto* e depois *Salvar*, ou apertando o botão de *Salva*  da barra de ferramentas. Escolhida uma dessas opções aparecerá a janela padrão de salvar arquivos do Windows, onde será digitado o nome do projeto, que o caso foi escolhido “VAZAO.PRJ”.

Com o projeto salvo, a simulação pode ser executada. Existem duas maneiras de iniciar a simulação, uma é pelo menu da janela principal, selecionando o menu *Simula* ou apertando o botão *Simula*  da barra de ferramentas.

Ao término da simulação, o programa SAAM ativará a janela dos *Resultados*, onde o botão *Exporta Resultado* estará habilitado, e conseqüentemente, o procedimento é o mesmo de salvar projeto, com a única diferença no nome, que será “VAZAO.DAT”. O usuário poderá utilizar este arquivo em qualquer planilha, editor de texto ou banco de dados, pois este será salvo em modo texto.



| Tempo | NIV<G>    | Q         |
|-------|-----------|-----------|
| 0     | 1,5       | 0         |
| 0,5   | 1,8835867 | 20,820662 |
| 1     | 2,2169577 | 23,331450 |
| 1,5   | 2,5107163 | 25,312068 |
| 2     | 2,7719782 | 26,936908 |
| 2,5   | 3,0059034 | 28,303740 |
| 3     | 3,2164270 | 29,473820 |
| 3,5   | 3,4066574 | 30,488479 |
| 4     | 3,5791149 | 31,377125 |
| 4,5   | 3,7358842 | 32,161533 |

FIGURA 14 – Janela com os resultados do exemplo simulado

O gráfico das variáveis escolhidas pode ser visualizado na fig.(15) a seguir. Bastando para isto apertar o botão do *Gráfico* da janela dos *Resultados*. No projeto do tanque de descarga contínua foi escolhida a variável do nível da água no tanque, ou seja, a “NIV”. É importante lembrar que o gráfico gerado não é muito elaborado e serve apenas para uma simples visualização.

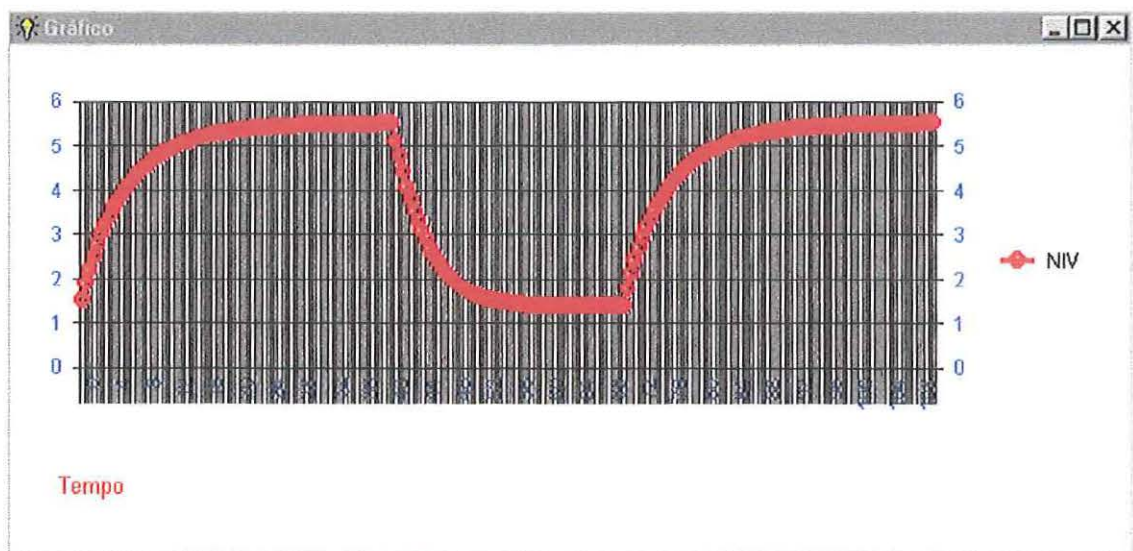


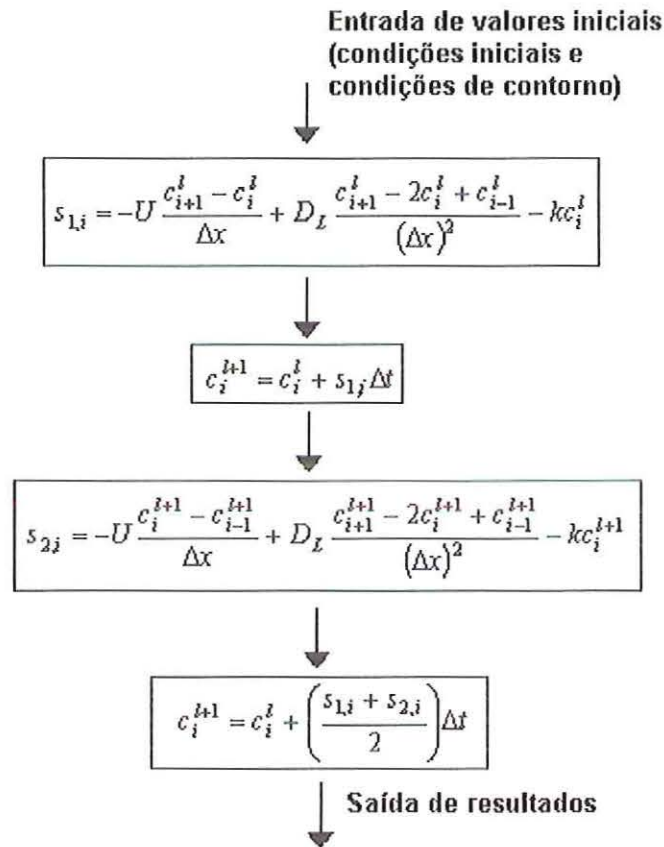
FIGURA 15 – Janela *Gráfico* com os resultados da variável NIV do exemplo simulado

### 3.2- Exemplo 2 – Caso1 (Silva(2003))

Este corresponde ao exemplo 12.1 do livro de Chapra. Será simulado o caso de um rio que recebe uma descarga instantânea de 5kg de uma substância conservativa (poluente) na posição de 0,5km a jusante de uma cidade. O transporte desta substância conservativa será analisado até uma distância de 3km. O rio em questão apresenta as características indicadas abaixo:

- Profundidade  $d= 1$  m;
- Largura do canal  $B= 60$  m;
- Área transversal  $A= 60$  m<sup>2</sup>;
- Vazão  $Q= 144000$  m<sup>3</sup>/h;
- Velocidade  $U= 2400$  m/h;
- Dispersão Longitudinal  $D_L= 150000$  m<sup>2</sup>/h.

Para casos de simulação de transporte de substâncias em cursos d'água como este exemplo será usado o Método de MacCormack implementado no programa SAAM Versão 2.0. Este método corresponde a uma seqüência de blocos característicos, como mostrado na figura a seguir.



**FIGURA 16** – Diagrama de blocos do Método de MacCormack

Os blocos que compõem o Método de MacCormack foram criados da maneira entendível pelo programa SAAM. Estes blocos correspondem a figura acima escritas da forma:

$$S1[I] = (E/X^2) * C[I-1] + (U/X - 2 * E/X^2 - K) * C[I] + (-U/X + E/X^2) * C[I+1] \quad (01)$$

$$C[I] = C[I] + S1[I] * T \quad (02)$$

$$S2[I] = (U/X + E/X^2) * C[I-1] + (-U/X - 2 * E/X^2 - K) * C[I] + (E/X^2) * C[I+1] \quad (03)$$

$$C[I] = C[I] + (S1[I] + S2[I]) / 2 * T \quad (04)$$

A figura a seguir mostra como ficam os blocos interligados correspondentes ao Método de MacCormack na janela *Fluxograma*.

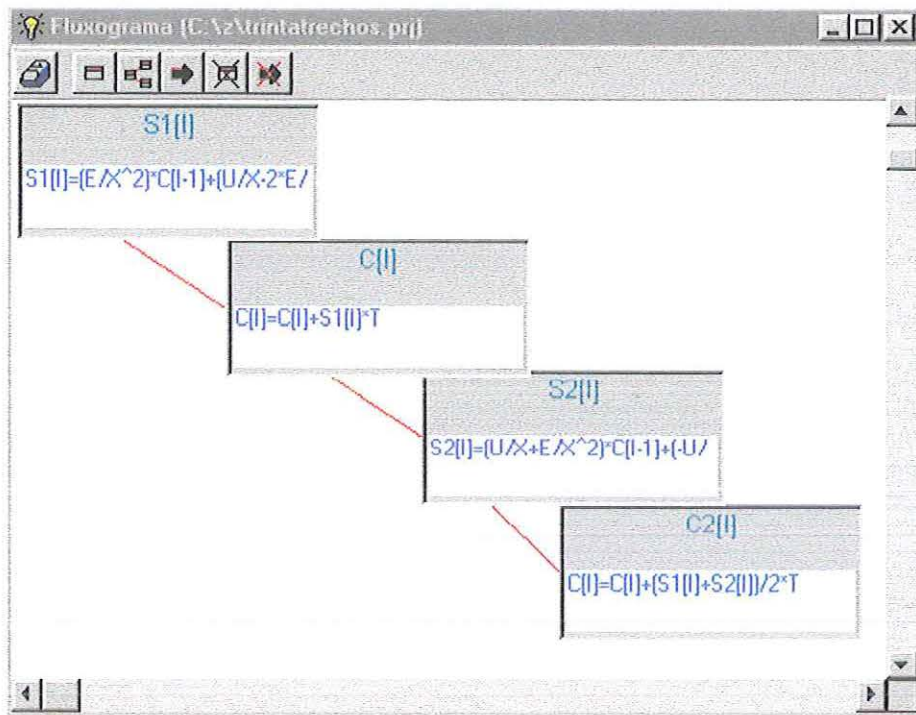


FIGURA 17 – Janela *Fluxograma* com os blocos do Método de MacCormack

Para a simulação no programa SAAM foi considerado que inicialmente o curso d'água apresentava concentração da substância conservativa de 0 mg/l em outros trechos do rio exceto, no trecho 0,5km, que devido a descarga do poluente, gerou uma concentração de 0,833 mg/l. O trecho do rio de 3km de extensão foi dividido em 30 trechos de 0,1 km cada. A fig.(17) mostra como fica preenchida a janela Condições de Simulação para este exemplo.

| Trecho | Início | Fim | Intervalo | C[0] | C[1] | C[2] | C[3] | C[4] | C[5]  |
|--------|--------|-----|-----------|------|------|------|------|------|-------|
| 1      | 0      | 0,6 | 0,025     | 0,0  | 0,0  | 0,0  | 0,0  | 0,0  | 0,833 |

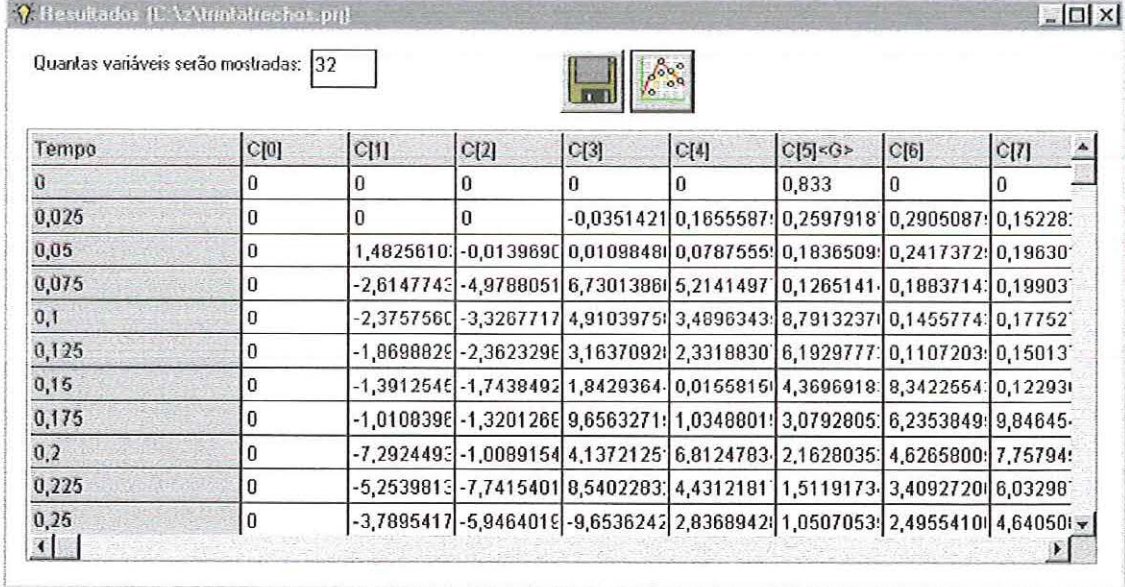
FIGURA 18 – Janela *Condições de Simulação* preenchida com os dados deste exemplo

O usuário deve notar que o item quantidade de trechos deste exemplo corresponde a quantidade de partes que foi dividido o curso d'água em questão. A este



número de trechos correspondem as variáveis C[índice do trecho]. Além destas variáveis que aparecem na grade de Condições de Simulação C[0] e C[31] que dizem respeito às condições de contorno. Extrapolando, haverá sempre C[índice do trecho] na quantidade que o usuário determinar mais duas.

A janela de Resultados, como citado anteriormente, deve ser definida com o número de variáveis mostradas de acordo com a preferência do usuário mas, sempre igual ao que foram criadas dentro dos blocos. Observe a grade de resultados na figura a seguir.



| Tempo | C[0] | C[1]       | C[2]       | C[3]       | C[4]      | C[5]<G>   | C[6]      | C[7]    |
|-------|------|------------|------------|------------|-----------|-----------|-----------|---------|
| 0     | 0    | 0          | 0          | 0          | 0         | 0,833     | 0         | 0       |
| 0,025 | 0    | 0          | 0          | -0,0351421 | 0,1655587 | 0,2597918 | 0,2905087 | 0,15228 |
| 0,05  | 0    | 1,4825610  | -0,0139890 | 0,0109848  | 0,0787555 | 0,1836509 | 0,2417372 | 0,19630 |
| 0,075 | 0    | -2,6147743 | -4,9788051 | 6,7301386  | 5,2141497 | 0,1265141 | 0,1883714 | 0,19903 |
| 0,1   | 0    | -2,3757560 | -3,3267717 | 4,9103975  | 3,4896343 | 8,7913237 | 0,1455774 | 0,17752 |
| 0,125 | 0    | -1,8698829 | -2,3623290 | 3,1637092  | 2,3318830 | 6,1929777 | 0,1107203 | 0,15013 |
| 0,15  | 0    | -1,3912546 | -1,7438492 | 1,8429364  | 0,0155816 | 4,3696918 | 8,3422654 | 0,12293 |
| 0,175 | 0    | -1,0108390 | -1,3201260 | 9,6563271  | 1,0348801 | 3,0792805 | 6,2353849 | 9,84645 |
| 0,2   | 0    | -7,2924493 | -1,0089154 | 4,1372125  | 6,8124783 | 2,1628035 | 4,6265800 | 7,75794 |
| 0,225 | 0    | -5,2539813 | -7,7415401 | 8,5402283  | 4,4312181 | 1,5119173 | 3,4092720 | 6,03298 |
| 0,25  | 0    | -3,7895417 | -5,9464010 | -9,6536242 | 2,8368942 | 1,0507053 | 2,4955410 | 4,64050 |

FIGURA 19 – Janela *Resultados* deste exemplo

A seguir pode ser visualizado gráfico produzido para a variável C[5].

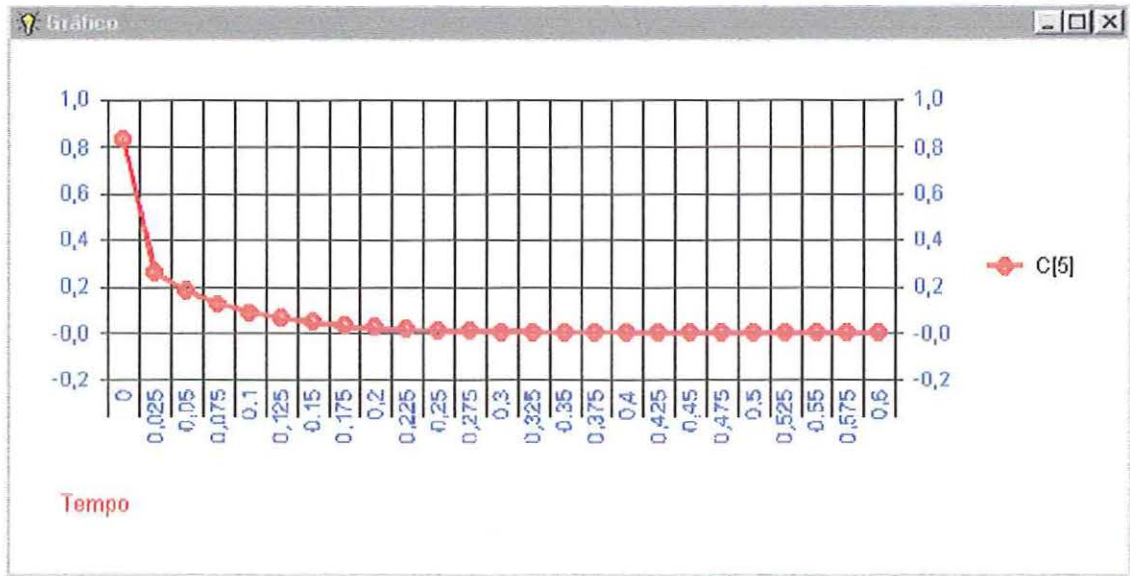


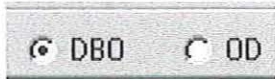
FIGURA 20 – Janela *Gráfico* para a variável C[5] deste exemplo

## 5- CONSIDERAÇÕES FINAIS

1- Para casos em que o usuário queira usar as funções DBO e OD basta que ele selecione estas funções na barra de botões após a simulação inicial de resultados como na figura a seguir.

2- Quando da simulação do parâmetro DBO a variável  $k$  da grade de simulação deverá ser preenchida com a soma dos valores de  $k_1$  e  $k_3$  (coeficiente de desoxigenação e coeficiente de sedimentação respectivamente).

3- É importante lembrar que para a simulação do parâmetro OD é fundamental o cálculo do parâmetro DBO anteriormente. E para a simulação procede-se marcando a função OD na barra de botões como na fig.(21), preencher a grade *Condições de Simulação – OD*, e executar através do botão *Calcula OD*. Para verificar os resultados basta verificar a janela de *Resultados – OD*. Deve-se salvar o projeto pelo botão *Salva Projeto OD* e salvar os dados pelo botão *Exporta Resultados* da janela de *Resultados – OD*. Para abrir projeto já salvo de simulação do parâmetro OD, deve-se abrir o projeto do parâmetro DBO, fazer a simulação deste, marcar o botão OD, abrir o projeto OD com o botão *Abre Projeto OD* e efetuar a simulação do OD.



**FIGURA 21** – Barra de botões de seleção das funções OD e DBO

Recomenda-se que o usuário, a cada novo projeto que deseje abrir, clique no botão *Novo* e logo após abra o projeto com o botão *Abre*.



**FIGURA 22** – Botão *Novo*



**FIGURA 23** – Botão *Abre*

Esta apostila foi elaborada com o objetivo de dar suporte ao usuário do programa SAAM Versão 2.0. Caso o usuário se interesse em ter acesso a outros exemplos seria interessante consultar a dissertação de Évora(1999) e além disso, poderá conhecer a versão original deste programa.

## **BIBLIOGRAFIA**

CHAPRA, S. C. (1997). *Surface water- quality modeling*. New York, McGraw-Hill.

EVORA, J. E. M. (1999). *Desenvolvimento do programa SAAM for Windows para simulação de processos de engenharia sanitária e ambiental*. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos.

FRANKS, R.G.E.(1972). *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*. New York, Wiley – Interscience.

SILVA, A. L. (2003). *Implementação da plataforma “SAAM for Windows” para a modelagem e simulação do transporte de poluentes em cursos d’água*. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos.

**APÊNDICE B** - CD de instalação do programa computacional SAAM e exemplos.