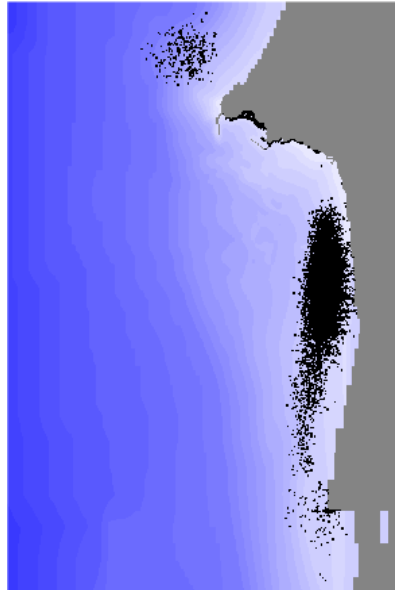


**INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO**

**LICENCIATURA EM ENGENHARIA DO AMBIENTE**



## **MODELAÇÃO DE DERRAMES DE HIDROCARBONETOS**

**TRABALHO FINAL DE CURSO**

**- RELATÓRIO FINAL -**

AUTOR: RODRIGO FERNANDES Nº 43402

ORIENTADOR: PROF. RAMIRO NEVES

CO-ORIENTADOR: ENG. JOSÉ CHAMBEL LEITÃO

31-10-2001

# MODELAÇÃO DE DERRAMES DE HIDROCARBONETOS

Autor: Rodrigo Manuel Fernandes

Orientador: Prof. Ramiro Neves

Co-orientador: Eng. José Chambel Leitão

## Sumário

A elevada frequência com que ocorrem acidentes de derrames de hidrocarbonetos no meio marinho é um importante problema, com particular relevância no nosso país, devido ao elevado tráfego marítimo que atravessa a Zona Económica Exclusiva Portuguesa.

A previsão e simulação da deriva, comportamento e características do óleo derramado são importantes para o desenvolvimento de planos de contingência e resposta à poluição, bem como para realização de estudos de impacte ambiental.

É desenvolvido um módulo de simulação das propriedades e dos processos específicos dos hidrocarbonetos derramados no mar ou em zonas costeiras, com vista à concretização de um modelo computacional capaz de prever a evolução físico-química a nível espacial e temporal dos produtos petrolíferos. São também integradas algumas técnicas de combate à poluição no modelo realizado.

São utilizados métodos alternativos para a previsão de alguns processos, como o espalhamento, evaporação, dispersão e emulsificação do óleo.

O módulo do petróleo é acoplado a um sistema de modelos integrados – ao modelo MOHID 2000 – recorrendo essencialmente aos seus módulos hidrodinâmico e de transporte lagrangeano. O primeiro processa os dados hidrodinâmicos necessários, enquanto que o segundo é um modelo de traçadores lagrangeanos que calcula as trajectórias do petróleo com base no campo de velocidades gerado pelo modelo hidrodinâmico. As trajectórias do petróleo são calculadas a partir do pressuposto que o petróleo pode ser idealizado como sendo um largo número de partículas que se movimentam na água.

Foram desenvolvidos testes para vários óleos, volumes e condições ambientais. Compararam-se os resultados obtidos com os escassos valores experimentais, e com as previsões feitas com o modelo ADIOS 2. Obtiveram-se resultados satisfatórios para a grande maioria das formulações introduzidas no modelo. Foi também realizada a simulação de um derrame ocorrido em Sines em 1989, e os resultados produzidos parecem ser concordantes com as observações feitas na altura, embora não haja informação concreta relativa à quantificação dos processos de envelhecimento sofridos pelo óleo e à aplicação dos meios de combate.

## Agradecimentos

Ao Professor Ramiro Neves (Maretec / IST) e ao Eng.º Chambel Leitão (Hidromod) - respectivamente orientador e co-orientador deste trabalho - , pela possibilidade que me ofereceram e pela confiança que demonstraram e me transmitiram para o desenvolvimento deste trabalho,

Ao Eng.º Frank Braunschweig (Maretec), pela disponibilidade e perspicácia na resolução de diversos problemas na programação e nos resultados obtidos,

Ao Eng. Ricardo Miranda (Colaborador da Hidromod), pelas importantes ajudas na programação e ligação ao modelo hidrodinâmico,

Ao Eng.º Paulo Chambel (Maretec) pela ajuda na integração na filosofia de trabalho da Maretec, e em particular no desenvolvimento do algoritmo do espalhamento do petróleo,

A todos os restantes colegas da Maretec e Hidromod, pela disponibilidade e boa disposição que facilitaram a realização deste trabalho.

## ÍNDICE

1	Introdução.....	1
1.1	Estrutura do Relatório.....	1
2	Conceitos Básicos / Estudo Bibliográfico.....	2
2.1	Fontes de Poluição Marítima por Hidrocarbonetos.....	2
2.2	Principais Consequências dos Derrames de Hidrocarbonetos.....	3
2.2.1	Consequências Ambientais.....	3
2.2.2	Consequências Económicas.....	6
2.3	Situação Portuguesa.....	7
2.3.1	Descrição dos principais acidentes ocorridos em Portugal.....	7
2.3.2	Orientação adoptada por Portugal.....	8
2.4	Alteração das Propriedades e Processos de Envelhecimento de produtos petrolíferos / Estado-de-Arte.....	10
2.4.1	Viscosidade.....	10
2.4.2	Densidade.....	11
2.4.3	Espalhamento.....	11
2.4.4	Evaporação.....	14
2.4.5	Dispersão.....	16
2.4.6	Sedimentação.....	18
2.4.7	Emulsificação.....	19
2.4.8	Dissolução.....	20
2.4.9	Degradação.....	21
2.5	Principais Métodos de Resposta a um Derrame de Petróleo.....	22
3	Modelo de Derrames de Hidrocarbonetos.....	23
3.1	Integração no Sistema MOHID.....	23
3.2	Características Gerais do Modelo.....	23
3.3	Módulo Hidrodinâmico.....	24
3.4	Módulo Lagrangeano.....	24
3.5	Módulo do Petróleo.....	25
3.5.1	Espalhamento.....	26
3.5.2	Restantes processos.....	28
3.5.3	Técnicas de remoção.....	28
4	Validação do Modelo.....	35
4.1	Espalhamento.....	35
4.1.1	Sem hidrodinâmica.....	35
4.1.2	Com hidrodinâmica.....	37
4.2	Envelhecimento.....	37
4.2.1	Diferentes óleos.....	38
4.2.2	Variação das condições ambientais.....	39
4.2.3	Comparação com dados experimentais.....	40
5	Aplicação a um Caso Real.....	41
5.1	Descrição do Acidente.....	41
5.2	Simulação do Acidente.....	41
6	Conclusões e Sugestões para o Futuro.....	46
6.1	Principais Limitações do Modelo desenvolvido e Resultados Obtidos.....	46
6.2	Desenvolvimentos futuros.....	48
	Bibliografia.....	49

## Índice de Tabelas

Tabela 1 – Estimativa das fontes de poluição marítima por hidrocarbonetos (Clark 1997) .....	2
Tabela 2 – Principais incidentes de derrames ocorridos em Portugal.....	7
Tabela 3 – Localização dos derrames registados nas últimas décadas .....	8
Tabela 4 – Conjunto das principais decisões nos diferentes planos adoptados por Portugal, respeitantes à poluição marítima por hidrocarbonetos .....	9
Tabela 5 -Fórmulas e coeficientes de Fay para os diferentes regimes de espalhamento .....	13

## Índice de Figuras

Figura 1- Comportamento de óleo derramado no mar e principais processos envolvidos.....	10
Figura 2 - Diagrama esquemático do funcionamento do modelo de previsão para derrames de óleo .....	24
Figura 3 - Espalhamento com o método de Fay (difusão) e gradiente de espessura para o crude Statfjord .....	35
Figura 4 – Comparação dos diferentes métodos de cálculo do espalhamento a diferentes volumes, para os crudes Panuke e Kuwait.....	36
Figura 5 - Campo de velocidades (a) e evolução do espalhamento (b-e) de crude Kuwait num tanque com hidrodinâmica 37	
Figura 6 – Evolução dos diferentes processos de envelhecimento para os crudes Kuwait e Panuke (Kuwait e Statfjord para a emulsificação), para um derrame de 2 000 m <sup>3</sup> .....	39
Figura 7 – Comparação de valores experimentais com resultados determinados pelo modelo, para o óleo Statfjord.....	40
Figura 8 -local do acidente do navio Marão no porto de Sines .....	41
Figura 9 - batimetria utilizada para a simulação do derrame no Porto de Sines .....	42
Figura 10 - Campo de velocidades no momento do derrame (14-7-89 - 12:00h) .....	43
Figura 11 - localização do óleo após o derrame.....	44
Figura 12 - evolução dos processos e propriedades do óleo derramado (Iranian Heavy) .....	45

# 1 Introdução

Os derrames de petróleo representam uma fracção relativamente pequena da poluição marítima (menos de 10%). Contudo, os danos ambientais podem ser bastante significativos. A origem deste tipo de poluição é variável, e não está só relacionada com acidentes de petroleiros. Estes representam apenas 10% do total de petróleo derramado no mar.

Portugal é um dos países de “elevado risco” de acidentes com hidrocarbonetos, uma vez que grande parte das rotas comerciais atravessa a Zona Económica Exclusiva (ZEE) portuguesa. Por outro lado, Portugal também importa todo o petróleo que consome. Como resultado desta conjuntura, tem-se verificado na ZEE portuguesa uma grande quantidade de derrames. As condições meteorológicas, hidrográficas e oceanográficas poderão agravar os efeitos de tais derrames.

Portanto, as consequências adversas que surgem com derrames deste tipo, motivam desde logo uma preocupação no que diz respeito não só à monitorização e acompanhamento da situação, mas também na capacidade de prever eficazmente o comportamento do óleo derramado nas horas seguintes. É neste contexto que se torna relevante o desenvolvimento de modelos de simulação de derrames de hidrocarbonetos capazes de fornecer resultados fiáveis para diversas condições ambientais e vários tipos de hidrocarbonetos. Refira-se ainda a importância de acoplar um modelo deste tipo a um modelo hidrodinâmico (como o MOHID2000) – a fiabilidade dos resultados no que toca à advecção das manchas é consideravelmente aumentada, especialmente em zonas onde os campos de correntes variam muito (por exemplo em estuários e zonas costeiras).

Assim, um modelo deste tipo é, por um lado, uma importante ferramenta para as autoridades responsáveis pelo combate à poluição marítima. Por outro lado permite a realização de análises dos efeitos de eventuais acidentes deste tipo em determinadas zonas, como por exemplo zonas de maior risco (ou seja, locais que congregam uma maior probabilidade dos acidentes e maior gravidade dos mesmos devido à sensibilidade desses locais).

O modelo desenvolvido neste trabalho prevê a evolução físico-química a nível espacial e temporal das propriedades e processos envolvidos após o derrame de produtos petrolíferos, aproveitando muitas das potencialidades de cálculo do sistema MOHID2000, principalmente no que respeita ao processamento de dados hidrodinâmicos e dispersão lagrangeana (assumindo-se então que o óleo derramado pode ser encarado como um conjunto de pequenas manchas, através dos traçadores lagrangeanos). São também integradas algumas técnicas de combate à poluição no modelo realizado.

## 1.1 ESTRUTURA DO RELATÓRIO

É feita uma descrição do enquadramento das questões relacionadas com a problemática da poluição marítima por hidrocarbonetos, analisando as principais consequências de um eventual derrame, bem como a importância e orientação de Portugal na presente matéria. Segue-se uma descrição das principais alterações das propriedades e processos de envelhecimento de produtos petrolíferos, bem como as equações disponíveis para os descrever. São ainda referidas algumas das principais técnicas no combate à poluição por produtos petrolíferos.

Aborda-se depois o funcionamento do modelo criado no âmbito deste trabalho, seguindo-se um capítulo relacionado com os diversos testes realizados e análise dos resultados produzidos. É ainda apresentada uma aplicação a um caso real, nomeadamente um acidente ocorrido com o petroleiro Marão, no Porto de Sines, em 89. Por último, são elaboradas as conclusões deste trabalho, analisando as limitações e potencialidades do modelo e recomendações para trabalhos futuros.

## 2 Conceitos Básicos / Estudo Bibliográfico

### 2.1 FONTES DE POLUIÇÃO MARÍTIMA POR HIDROCARBONETOS

É difícil determinar a quantidade total de hidrocarbonetos introduzidos no meio marinho. As estimativas variam entre 1.7 e 8.8 milhões de toneladas/ano. A melhor estimativa, realizada em 1989 é de 2,5 milhões de toneladas por ano, embora desde então algumas fontes já tenham sido reduzidas. Este tipo de poluição marítima pode ser proveniente de diversas fontes:

Transporte (operações com navios, acidentes com petroleiros, despejos de lastro)	23.5%
Instalações fixas (refinarias costeiras, explorações "off-shore", terminais)	7.6%
Fontes naturais	10.6%
Transferência de poluição atmosférica para o mar	12.7%
Outras fontes (descargas urbanas, municipais, industriais)	45.6%

Tabela 1 – Estimativa das fontes de poluição marítima por hidrocarbonetos (Clark 1997)

Uma das maiores contribuições dos hidrocarbonetos introduzidos anualmente nos oceanos do mundo provém de fontes de origem terrestre (a chamada poluição telúrica), através de descargas industriais e esgotos urbanos, bem como a lixiviação de óleos usados depositados nas terras e estradas, sendo depois conduzidas aos cursos de água.

O transporte marítimo é responsável por uma quantidade estimada em 555 000 toneladas de petróleo por ano (23.5% do total). A maior parte é proveniente de descargas resultantes de operações normais dos navios – por exemplo operações de abastecimento ou de carga/descarga – e apenas uma pequena fracção deve-se a acidentes de navios petroleiros, que são a face mais mediática deste tipo de poluição, devido à "espectacularidade" destes derramamentos de petróleo bruto no mar, provocados por erros de navegação ou por colisões com rompimento do casco, muitas vezes acompanhados de incêndios.

A poluição atmosférica pode ser responsável por mais de 12% da poluição marinha, e está principalmente relacionada com os gases libertados pelos motores de combustão. Estes hidrocarbonetos são levados para a atmosfera e podem precipitar-se no mar.

As restantes fontes de hidrocarbonetos podem ter origem em instalações fixas como por exemplo resíduos de refinarias costeiras descarregados no mar, explorações "off-shore" (ensaios e descargas operacionais).

A lixiviação natural das rochas (erosão dos fundos oceânicos) contribui ainda para uma parte da introdução de hidrocarbonetos no mar, através de fontes naturais.



## 2.2 PRINCIPAIS CONSEQUÊNCIAS DOS DERRAMES DE HIDROCARBONETOS

Um derrame de crude, por menor que seja, tem sempre consequências negativas. Estas consequências são principalmente importantes a nível ambiental e económico. A extensão dos efeitos de um acidente deste tipo depende de um conjunto de factores agravantes, como por exemplo, o volume e propriedades do produto derramado, condições meteorológicas durante o derrame (vento, agitação do mar, etc.), época do ano, sensibilidade do local, medidas de combate implementadas, etc.

De seguida, explica-se de que forma podem ser sentidos os efeitos por este tipo de desastres.

### 2.2.1 Consequências Ambientais

#### 2.2.1.1 Consequências nos ecossistemas em geral

Tal como foi referido anteriormente, os derrames de crude põem em risco os habitats e ecossistemas, especialmente os mais precários. Isto é particularmente grave quando são atingidas áreas protegidas, povoadas por fauna ou flora raras e em vias de extinção. Estes impactes podem também variar com o tipo de óleo e sua composição, e época do ano em que ocorre o acidente.

Em termos gerais, podemos referir como algumas consequências para o ambiente o facto de o petróleo impedir as trocas gasosas através da água (menor oxigenação da água e consequente redução de processos de autodepuração) e infiltrar-se em lençóis subterrâneos, destruindo plantas e animais.

Além disso, a partir do material derramado, são libertados chumbo e outros metais pesados para a atmosfera, contaminando-a. Verificam-se também alterações nas radiações absorvidas (UV), aumentando a temperatura e reduzindo a luminosidade e síntese clorofílica. Poderá haver alteração do pH da água.

Todas estas alterações nas propriedades da água vão conduzir ao desaparecimento de muitas espécies – a água adquire uma falsa aparência limpa, dado que fica cristalina pela morte do fitoplâncton e fauna marinha, que lhe dá uma aparência mais turva – ficando espaços livres que são ocupados por espécies melhor adaptadas às novas condições, ou espécies que se encontravam latentes, e que agora proliferam devido à falta de concorrência.

A composição do petróleo condiciona fortemente a toxicidade – as diversas fracções do óleo relacionam a sua toxicidade a curto prazo com os produtos destilados, a longo prazo com os produtos de acção lenta e de um modo indirecto com os produtos degradados biologicamente (biodegradação) ou por processos físico-químicos (oxidação fotoquímica).

Assim, nos produtos refinados a toxicidade é maior nos produtos com ponto de ebulição mais baixo, enquanto que nos óleos crude são as fracções mais voláteis (que são mais solúveis na água) e os compostos aromáticos que são mais tóxicos.

Estes compostos aromáticos – hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH-Polycyclic Aromatic Hydrocarbons) – apresentam diversas características nefastas, entre as quais o facto de serem mutagénicos (quanto maior a fracção de PAH na constituição do crude, mais pronunciado este efeito), e carcinogénicos para os mamíferos, porque activam metabolitos reactivos no organismo. Os PAH têm capacidade de se acumularem nos sedimentos, nos seres vivos aquáticos e, em menor grau, na coluna de água.

Óleos menos viscosos têm mais tendência para aderir a sedimentos, pelo que se estes forem contaminados por hidrocarbonetos, a probabilidade de impactes a longo prazo aumenta consideravelmente.

Os efeitos nos ecossistemas podem variar muito com a época do ano em que ocorre o acidente. Ao nível da flora, um acidente no Inverno pode ter efeitos reduzidos, uma vez que muitas plantas morrem naturalmente nesta época do ano. Contudo, o óleo pode afectar a germinação na Primavera seguinte. Uma contaminação no Verão ou Primavera pode limitar fortemente o crescimento das plantas e a produção de sementes.

Para a fauna, nos meses de Inverno podem ser vistos largos grupos de aves migratórias alimentando-se em estuários e zonas costeiras. Assim, nessas alturas os efeitos de um derrame são consideravelmente maiores.

### 2.2.1.2 Consequências nos seres vivos

#### Peixes:

Ao contactarem directamente com o produto, os peixes sofrem dificuldades respiratórias e de locomoção, pois ficam presos na camada de petróleo e acabam por morrer. Muitas espécies têm, no entanto, quimiorreceptores que detectam o petróleo na água, logo migram para águas que não tenham sido atingidas (mais observado nos peixes de profundidade).

A ingestão do petróleo provoca nos peixes lesões hepáticas.

A exposição dos ovos ao petróleo causa:

- aumento da taxa de malformações;
- crescimento lento;
- diminuição da performance natatória.

#### Mamíferos:

O produto combustível cola-se ao pêlo, impedindo-o de exercer a sua função termorreguladora. Como consequência, os animais entram em hipotermia. O petróleo também apaga o odor natural dos animais, impedindo o reconhecimento entre pais e filhos, que deixam assim de ser alimentados pelos pais.

Ao verem-se com necessidade de ir à superfície respirar, os mamíferos marinhos sofrem um tamponamento das vias respiratórias, morrendo por asfixia.

A exposição ao óleo provoca irritação das mucosas, principalmente da mucosa ocular.

Os animais tentam permanecer o maior tempo possível submersos, originando-se perdas de resistência, que podem levar à desnutrição. A escassez de alimento resultante do desaparecimento de outros seres vivos também contribui para a desnutrição.

A ingestão do óleo provoca:

- falhas hepáticas;
- destruição do epitélio intestinal, com consequente diminuição da absorção de nutrientes;
- desordens neurológicas;

- bioacumulação, principalmente dos PAH, como já foi referido.

**Aves:**

À medida que a plumagem fica impregnada de óleo, diminui a sua capacidade de repulsão da água, que penetra para debaixo das penas, retirando o ar aí aprisionado, que permite às aves flutuarem e regularem a temperatura corporal. Como consequência, por um lado, começam a afundar e afogam-se, e por outro, não conseguem manter a temperatura corporal constante e entram em hipotermia. Para se manterem quentes, aumentam rapidamente o seu metabolismo, levando a um esgotamento das reservas energéticas, e acabam por morrer.

A ingestão de hidrocarbonetos (ao tentarem limpar as penas ou através de alimentos contaminados) provoca:

- lesões no fígado e rins;
- lesões no tracto gastrointestinal, levando à diminuição da absorção de nutrientes, mais crítica em aves jovens, que começam a apresentar atrasos de crescimento;
- lesões nas glândulas adrenais;
- diminuição dos glóbulos vermelhos – anemia.

O desaparecimento de peixes e plâncton faz com que diminua o alimento disponível e muitas aves morram de fome.

Verifica-se uma redução da postura e eclosão dos ovos, porque, durante a incubação, o óleo nas penas das aves contaminadas deposita-se à superfície do ovo, matando o embrião.

Nem os processos meticulosos de limpeza conseguem restaurar as condições respiratórias normais das aves, diminuindo a sua capacidade de movimentação e sobrevivência.

**Outros animais:**

Os mexilhões e outros moluscos que se fixam nas rochas e objectos, perdem a sua capacidade de aderência, caem e morrem.

A ingestão de petróleo nos seres ditos inferiores, provoca:

- bioacumulação;
- aumento da taxa respiratória;
- diminuição de assimilação de nutrientes;
- aumento da taxa de mortalidade.

Estes efeitos são crónicos.

**Flora estuarina:**

Os efeitos podem ser variáveis, consoante o estado de crescimento das plantas ou estação do ano. Destaca-se essencialmente o sufoco das zonas cobertas pela mancha, e o impacte provocado pela passagem de pessoal e equipamento. A restauração pode demorar 2 a 3 anos se a água for renovada e os nutrientes fornecidos.

## 2.2.2 Consequências Económicas

Um dos factores que pode assumir uma grande importância num derrame de crude são os prejuízos económicos. As restrições na área afectada pelo derrame a navios comerciais, desportos aquáticos, pesca desportiva e comercial, exploração de portos e marinas e outras actividades podem trazer severas consequência na economia local, e prolongar-se por outras actividades.

### 2.2.2.1 Actividades recreativas

A contaminação de áreas costeiras são um fenómeno comum em muitos derrames, conduzindo a uma perturbação pública e interferência com o turismo e algumas actividades recreativas e desportivas, tais como natação, pesca e mergulho, especialmente se o derrame ocorrer durante a época balnear.

Os proprietários de hotéis e restaurantes, e outros que dependem do turismo poderão ser igualmente afectados.

O distúrbio deste tipo de actividades, provocados por um derrame de óleo são de duração relativamente curta, e os efeitos no turismo são geralmente uma questão de restabelecer a confiança da população, assim que as operações de limpeza estejam terminadas.

### 2.2.2.2 Actividades industriais

Para além do prejuízo para as companhias petrolíferas, pode-se salientar as indústrias que necessitam de um abastecimento contínuo que água do mar em boas condições. Refira-se o caso de centrais termoeléctricas, que se podem ver obrigadas a diminuir o rendimento ou mesmo a encerrar completamente, caso se verifique a entrada de quantidades significativas de hidrocarbonetos para os tubos condensadores. Da mesma forma, podem ser afectadas estações dessalinizadoras.

### 2.2.2.3 Actividades piscatórias e aquicultura

Os prejuízos a nível da pesca são importantes, uma vez que os peixes desaparecem das zonas atingidas e, na maior parte das vezes, esta actividade é suspensa durante algum tempo. Os efeitos na aquicultura, crustáceos e moluscos também são enormes. As espécies filtradoras (como os moluscos) ingerem grande quantidade de tóxicos e morrem, convertendo-se em animais impróprios para consumo humano, com o conseqüente prejuízo para as pessoas que vivem da sua comercialização. Estes prejuízos tornam-se mais graves quando estas pessoas não têm outras fontes de rendimento e dependem destes recursos.

Contudo, estudos efectuados durante grandes derrames mostraram que a possibilidade de efeitos a longo prazo é remota, uma vez que a normal produção de ovos é elevada e o excedente permite a existência de uma reserva para compensar perdas localizadas (ITOPF 2000).

Os prejuízos podem abalar a confiança no mercado, visto que os consumidores podem mostrar receio em adquirir produtos afectados pelo acidente. Surgem assim restrições e punições à actividade piscatória após o derrame, com o intuito de assegurar a confiança no mercado e proteger a pesca de peixes, crustáceos e mariscos contaminados.

Um derrame de óleo pode ainda provocar danos directos nas embarcações e respectivos motores usados na pesca.

## 2.3 SITUAÇÃO PORTUGUESA

### 2.3.1 Descrição dos principais acidentes ocorridos em Portugal

Portugal tem sido, de facto, um país bastante afectado por derrames de hidrocarbonetos. A próxima tabela, referente aos maiores acidentes ocorridos no território nacional, mostra que o território nacional sofre em média um acidente grave por ano:

Navio	Tipo de Incidente	Local	Data	Quantidade e produto derramado
Jacob Maersk	Encalhe	Porto Leixões	Jan 75	80 000 ton. Crude Iranian Light
Alchemist Emden	Encalhe	Ericeira	Jul 78	1 600 ton. Produtos quimicos
Nisa	Operação	Porto Sines	Mai 87	900 ton. Crude Arabian Light
Reijin	Encalhe	Douro	Abr 88	430 ton. Combustível e lubrificantes
River Gurara	Encalhe	Espichel	Fev 89	900 ton. Combustível e lubrificantes
Marão	Rombo	Sines	Jul 89	4 500 ton. Crude Iranian Heavy
Aragon	Rombo	Porto Santo	Jan 90	25 000 ton. Crude Maya
Entrust Faith	Afundamento	Ponta Delgada	Dez 91	1200 ton. Fuel
Desconhecido	Lavagem de tanques	Figueira da Foz	Dez 92	800 ton. Crude Maya
Ronjay Tihi	Encalhe	Leixões	Out 93	220ton. Fuel + 70ton. Diesel Oil e lubrificantes
Vianna	Incêndio/afundamento	Porto da Horta	Abr 94	500 ton. Diesel + 10 ton. Lubrificantes
Cercal	encalhe	Porto de Leixões	Out 94	3 000 ton. Crude Arabian Light
New World	Colisão/rombo	3612N – 1300 W	Dez 94	30 000 ton. Crude Rabi Light
Desconhecido	Lavagem de tanques	Figueira da Foz	Ago 98	500 ton. Crude degradado
Coral Bulker	Encalhe	Viana do Castelo	Dez 00	540 ton. Fuel e gasóleo

Tabela 2 – Principais incidentes de derrames ocorridos em Portugal

No que respeita à localização dos totais de acidentes registados em território português nas últimas décadas, o Departamento Marítimo do Centro apresenta a maior fatia (como se pode observar na tabela seguinte), devido à sua vasta área de jurisdição, englobando três portos bastante importantes – Lisboa, Setúbal e Sines.

Década	Norte	Centro	Sul	Madeira	Açores	ZEE	Total
70	55	165	3	4	5	23	255
80	83	317	13	8	13	36	470
90	104	405	27	19	41	143	739

Tabela 3 – Localização dos derrames registados nas últimas décadas

O facto de o número de registos ter aumentado significativamente nos últimos anos pode não significar um aumento real de acidentes, mas sim um aumento significativo de detecções de manchas de poluição devido ao maior patrulhamento efectuado através de voos sobre o mar e uma maior qualidade dos meios empregues nessas missões.

Refira-se ainda que mais de metade das quantidades derramadas e acidentes registados ocorreram especificamente nos portos devido a operações com navios.

### 2.3.2 Orientação adoptada por Portugal

Embora Portugal assuma um importante papel nas principais rotas internacionais de transportes de hidrocarbonetos, a preparação do País para evitar, prevenir e combater derrames de hidrocarbonetos tem ficado, até há bem pouco tempo, bastante aquém daquilo que seria adequado. Também no que concerne à protecção dos habitats marinhos e costeiros, a situação de Portugal tem sido a mesma.

Apesar de tudo, no plano nacional, várias medidas têm vindo a ser tomadas nos últimos anos. Sublinhe-se a adopção do Plano de Emergência – PML (Plano Mar Limpo) em 1993, e a recente modificação do regime de contra-ordenações no âmbito da poluição do meio marinho (deliberada em Setembro de 2000). Portugal teve em vigor até há alguns meses atrás um regime de contra-ordenações que durante vários anos era perfeitamente ridículo, em que a multa mais elevada para os infractores não ultrapassava os mil contos. Era vulgar certas embarcações explorarem deliberadamente as deficiências da legislação portuguesa.

Ainda recentemente a limpeza manual com balde e pá era o processo mais frequentemente utilizado para remover o material derramado. Nos últimos tempos tem sido adquirido novo equipamento de combate à poluição por hidrocarbonetos, devido à criação de programas Comunitários (programa ENVIREG). Foi também celebrado em Junho de 1999 um protocolo entre os Ministérios da Defesa Nacional e do Ambiente no sentido de equipar e operar um navio de combate à poluição por hidrocarbonetos na orla costeira. Para além disso, sublinhe-se o processo em curso da construção dos sistemas de controlo do tráfego marítimo VTS, que vai permitir uma melhoria das condições de segurança da navegação a nível local e portuário e também a nível regional permitindo um afastamento da costa do Esquema de Separação de Tráfego.

A ratificação na última década de algumas Convenções Internacionais relacionadas com esta temática tem permitido uma melhoria significativa na abordagem dos problemas de poluição marítima. Sublinhe-se a assinatura da MARPOL 73/78 em 93 e da Convenção sobre o Direito do Mar, em 97.

Mais longe vai ainda a Política Europeia nesta matéria, proporcionando não só a aquisição de novos equipamentos, como já foi referido, mas também a realização de uma série de acções no sentido de permitir aos estados membros uma melhor capacidade de resposta a este tipo de acidentes e uma cooperação entre os estados. Refira-se que muitas vezes as partes contratantes das Convenções não estão em posição de, isoladamente, tomar medidas eficazes e adequadas à problemática

da poluição dos mares, já que pode ter consequências transnacionais. Daí a importância da acção Comunitária. Neste âmbito, foram criados diversos acordos regionais – saliente-se o Acordo de Lisboa, assinado em 1990, e à espera de ser ratificado por todas as Partes.

Para informação mais detalhada, ver anexo relativo à orientação adoptada por Portugal.

### 2.3.2.1 Síntese da Orientação adoptada por Portugal

Medidas tomadas por Portugal		Descarga de produtos petrolíferos	DL n.º 46 619 de 27-10-1965
		Poluição das águas, praias e margens	DL n.º 90/71 de 22-03-1971
		Lei de Base do Ambiente	DL n.º 11/87 de 07-04-1987
		Poluição Marinha (aprovação do Plano Mar Limpo)	Resolução Cons. Ministros n.º 25/93 de 15-04
		Plano Nacional da Política do Ambiente	Resolução Cons. Ministros n.º 38/95 de 21-04
		Poluição do meio marinho – contra-ordenações	DL n.º 235/2000 de 26-09-2000
Convenções Internacionais	Poluição voluntária	Oslo 1972	DL n.º 491/72 de 06-12-72
		LDC 1972	DL n.º 2/78 de 07-01-78
		PARIS 1974	DL n.º 1/78 de 07-02-78
		OSPAR 1992	DL n.º 59/97 de 31-12-97
	Poluição acidental	LL/LOAD LINES 1966	DL n.º 49209 de 26-08-69
		COLREG 1972	DL n.º 55/78 de 27-06-78
		SOLAS 1974	DL n.º 79/83 de 14-10-83
		CLC 1969	DL n.º 694/76 de 26-9-76
		INTERVENTION 1969	DL n.º 88/79 de 21-08-79
		FUND 1971	Decreto n.º 13/85 de 21-06-85
Poluição operacional	MARPOL 73/78	DL 25/87 de 10-7-87	
Política Europeia		Poluição aquática por substâncias perigosas	Directiva do Conselho n.º 76/464/CEE de 04-05-76
		Programa de acção das Comunidades Europeias em matéria de controlo e de redução da poluição causada pelos derrames de hidrocarbonetos no mar	Resolução do Conselho de 26-06-78
		Acordo de Lisboa	Decreto n.º 37/91 de 18-05-91
		Quadro Comunitário para a cooperação no domínio da poluição marinha acidental ou deliberada	Decisão n.º 2850/2000/CE do Parlamento Europeu e do Conselho de 20-12-2000

Tabela 4 – Conjunto das principais decisões nos diferentes planos adoptados por Portugal, respeitantes à poluição marítima por hidrocarbonetos

## 2.4 ALTERAÇÃO DAS PROPRIEDADES E PROCESSOS DE ENVELHECIMENTO DE PRODUTOS PETROLÍFEROS / ESTADO-DE-ARTE

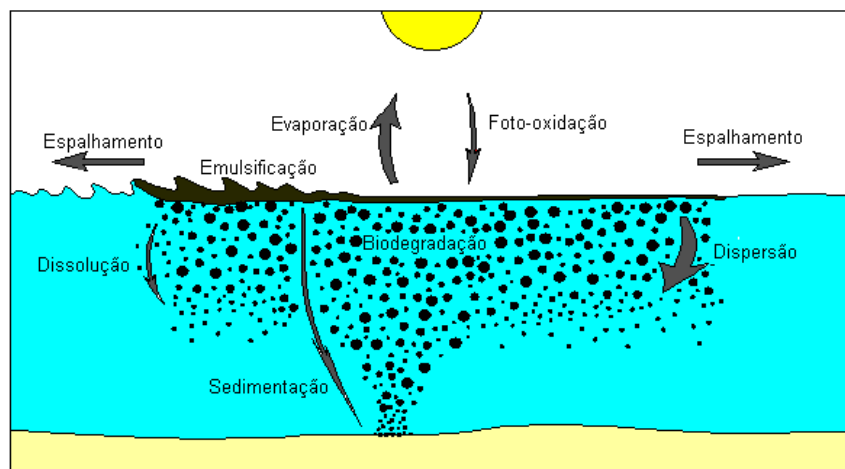


Figura 1- Comportamento de óleo derramado no mar e principais processos envolvidos

Cada produto petrolífero é composto por variados componentes com propriedades distintas, existindo centenas de óleos com composições diferentes. O comportamento desses mesmos óleos derramados na água é, portanto, muito diferente, e a obtenção de formulações capazes de reproduzir esses mesmos comportamentos para a variedade de óleos existentes é uma tarefa extremamente difícil. Para além disso, muitos dos processos envolvidos no envelhecimento do petróleo são ainda pouco claros (como é o caso da emulsificação).

Assim, é natural que muitas das formulações habitualmente utilizadas para modelar este tipo de acidentes sejam fundamentalmente empíricas, algumas delas sendo muito simplificadas.

### 2.4.1 Viscosidade

A viscosidade do óleo pode ser vista como é a medida de resistência do fluido ao movimento. Óleos muito viscosos têm tendência a movimentarem-se com maior dificuldade. Esta propriedade tem forte influência na aplicação de algumas técnicas de limpeza – dispersantes químicos e skimmers são ineficazes para produtos altamente viscosos – e é também um factor condicionante da dispersão; segundo Delvigne & Sweeney (1988), a viscosidade do óleo define a dimensão das partículas formadas na dispersão.

A viscosidade é fortemente influenciada pela temperatura, e aumenta à medida que o óleo envelhece e aumenta a evaporação das fracções leves e formação de emulsão com a água.

A influência da temperatura pode ser determinada pela correlação de Andrade:

$$\mu = \mu_0 e^{c_T \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)} \quad (\text{S.I.}) \quad (1)$$

em que  $\mu$  é a viscosidade à temperatura  $T$ ,  $\mu_0$  é a viscosidade inicial do óleo à temperatura de referência  $T_0$  e  $c_T$  é uma constante empírica cujo valor recomendado pela NOAA (1994) é de 5000 K.



A modificação da viscosidade devido à emulsificação é geralmente definida pela equação de Mooney (1951):

$$\mu = \mu_0 e^{\left[ \frac{c_V F_{wv}}{(1 - c_M F_{wv})} \right]} \quad (\text{S.I.}) \quad (2)$$

onde  $F_{wv}$  é a fracção volúmica de água na emulsão,  $c_V$  é uma constante empírica adimensional (Mackay et al., 1980 recomenda o valor de 2.5) e  $c_M$  é a constante adicional de Mooney, cujo valor é de 0.65.

O efeito da evaporação na viscosidade é contabilizado da seguinte forma (Mackay et al., 1980):

$$\mu = \mu_0 \cdot e^{(c_E F_{em})} \quad (\text{S.I.}) \quad (3)$$

$F_{em}$  é a fracção em massa de óleo evaporado, e a constante empírica adimensional  $c_E$  depende do tipo de óleo, variando entre 1 e 10, assumindo valores mais elevados para produtos mais viscosos.

Tendo em conta as três equações anteriores, é possível obter uma correlação final para a modificação do óleo:

$$\mu = \mu_0 \cdot e^{\left[ (c_E F_{em}) + \frac{c_V F_{wv}}{(1 - c_M F_{wv})} + c_T \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]} \quad (\text{S.I.}) \quad (4)$$

## 2.4.2 Densidade

A maior parte dos óleos e produtos refinados são menos densos que a água, flutuando livremente na superfície após o derrame. A experiência indica também que as manchas de óleo que inicialmente flutuam, têm tendência a permanecer à superfície, exceptuando casos em que há uma forte mistura do óleo com sedimentos, ou quando há combustão, originando a formação de resíduos altamente densos.

Contudo, o óleo torna-se menos flutuante (a densidade aumenta) ao longo do tempo, à medida que as fracções mais voláteis se evaporam, e há formação de emulsões água-no-óleo. A temperatura também influencia a densidade do óleo, pelo que se este for derramado numa água que está a uma temperatura inferior do óleo, a sua densidade vai aumentando à medida que a sua temperatura se vai reduzindo até à temperatura da água.

A influência destes factores na densidade pode ser contabilizada através da seguinte equação:

$$\rho_e = F_{wv} \cdot \rho_w + \rho_{oil} (1 - F_{wv}) (1 + c_{DE} F_e) [1 - c_{DT} (T - T_0)] \quad (\text{S.I.}) \quad (5)$$

em que  $\rho_e$  é a densidade da emulsão à temperatura  $T$ ,  $\rho_{oil}$  é a densidade do óleo fresco à temperatura de referência  $T_0$ ,  $\rho_w$  é a densidade da água,  $c_{DE}$  e  $c_{DT}$  são constantes empíricas (NOAA (1994) recomenda os seguintes valores:  $c_{DE} = 0.18$  e  $c_{DT} = 8 \times 10^{-4}$ ).

## 2.4.3 Espalhamento

Pode-se definir o espalhamento natural do óleo como o aumento da área da mancha devido à tendência que o óleo tem para se espalhar em água parada. Esta tendência é explicada pelas forças gravítica e tensão superficial, e contrariada pelo

efeito inercial e viscosidade interfacial (óleo-água). Fay (1969) analisou este balanço de forças, assumindo que a mancha é circular e que a espessura do óleo na mancha é homogénea.

Nos primeiros minutos após o derrame, o espalhamento é, provavelmente, o processo predominante. Após algum tempo, e mediante a existência de vento forte, mar agitado e efeito das correntes, a mancha pode ser deformada, fragmentada e dispersa. Nestas condições, a aproximação de Fay torna-se inaplicável. Contudo, numa fase inicial do derrame, o cálculo da área da mancha pode ser estimado pela teoria de Fay ou outra teoria modificada, até porque a área é um parâmetro importante não só para o desenvolvimento de estratégias de defesa e contenção da mancha, mas também porque alguns processos de envelhecimento (como a evaporação, por exemplo) dependem directamente da área superficial ocupada.

Assim, segundo Fay, o espalhamento pode ser dividido em três fases, cada uma delas dominada por duas forças. Imediatamente após o derrame, o espalhamento é comandado pelas forças gravíticas – trata-se da fase gravítica-inércia. Após um período de tempo curto segue-se a fase gravítica-viscosa, em que a força gravítica é balanceada pela viscosidade interfacial óleo-água. Quando a espessura da mancha é muito pequena, a força gravítica deixa de ser importante, sendo o espalhamento dominado pelas forças de tensão superficial, e contrariado pela viscosidade interfacial – esta é a fase tensão superficial-viscosa.

A equação de Fay que descreve o balanço das forças acima mencionado é a seguinte:

$$\alpha_1(\rho_w - \rho_{oil})gh^2 + \alpha_2\sigma_n = \frac{\alpha_3\rho_w v_w^{1/2}}{t^{1/2}} R \frac{dR}{dt} + \rho_w h \left( \frac{dR}{dt} \right)^2 \quad (S.I.) \quad (6)$$

onde:

R – raio da mancha assumindo um espalhamento

t – tempo após o derrame

axissimétrico

$v_w$  – viscosidade cinemática da água

$\rho_w$  – densidade da água

h – espessura da mancha

$\rho_o$  – densidade do óleo

$\alpha_1, \alpha_2$  e  $\alpha_3$  são constantes empíricas adimensionais, que podem ser estimadas como sendo  $\alpha_1=0.42$ ,  $\alpha_2=1.64$ ,  $\alpha_3=0.86$ , segundo Stolzenbach (1977).

$\sigma$  – tensão interfacial óleo-água

g – aceleração da gravidade

As soluções dessa mesma equação para as três fases assumem as seguintes formas, com todas as unidades no Sistema Internacional:

Fase de espalhamento	L	R	D
Gravítica-inércia	$1.39(\Delta g A t^2)^{1/3}$	$k_1(\Delta g V t^2)^{1/4}$	$\frac{\pi k_1^2}{8} (\Delta g V t)^{1/2}$
Gravítica-viscosa	$1.39 \left( \frac{\Delta g A^2 t^{3/2}}{v_w^{1/2}} \right)^{1/4}$	$k_2 \left( \frac{\Delta g V^2 t^{3/2}}{v_w^{1/2}} \right)^{1/6}$	$\frac{\pi k_2^2}{16} \left( \frac{\Delta g V^2}{v_w^{1/2}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$

Tensão superficial-viscosa	$1.43 \left( \frac{\sigma^2 t^3}{\rho_w^2 v_w} \right)^{1/4}$	$k_3 \left( \frac{\sigma^2 t^3}{\rho_w^2 v_w} \right)^{1/4}$	$\frac{3\pi k_2^2}{16} \left( \frac{\sigma}{\rho_w v_w^{1/2}} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{t}}$
----------------------------	---	--	---

Tabela 5 -Fórmulas e coeficientes de Fay para os diferentes regimes de espalhamento

L - comprimento característico da mancha para um espalhamento unidimensional

D - o coeficiente de difusão, muitas vezes utilizado para cálculo do espalhamento com base em modelos trajetórias de partículas lagrangeanas.

$$\Delta = (\rho_w \rho_o) / \rho_w$$

V- volume do óleo derramado

$$A = 0.5V / \text{unidade de comprimento da mancha}$$

k<sub>1</sub>, k<sub>2</sub> e k<sub>3</sub> assumem diferentes valores por diferentes autores. Os valores recomendados por Flores *et al.*(1999) são, respectivamente, 0.57, 0.725 e 0.5.

Uma vez que a fase inicial é muito curta, muitas vezes não chega sequer a ser modelada directamente, sendo hábito calcular a área (A<sub>0</sub>) e o tempo (t<sub>0</sub>) em que esta fase termina, iniciando-se a fase gravítica-viscosa:

$$t_0 = \left( \frac{k_2}{k_1} \right)^4 \left( \frac{V_0}{\Delta g v_w} \right)^{1/3} \quad (\text{S.I.}) \quad (7)$$

$$R_0 = \frac{k_2^2}{k_1} \left( \frac{\Delta g V_0^5}{v_w} \right)^{1/12} \quad (\text{S.I.}) \quad (8)$$

A área no final da primeira fase é, assim, muitas vezes assumida como a área inicial da mancha.

Para além disso, a terceira fase é também frequentemente inaplicável, uma vez que esta fase só se inicia quando a mancha já é muito fina, resultando muitas vezes numa divisão em pequenas manchas devido aos efeitos do vento e vagas. Desta forma, os pressupostos de Fay não são satisfeitos, visto que a mancha deixa de ser única.

Portanto, é comum utilizar apenas a fase gravítica-viscosa para calcular o espalhamento, assumindo que quando a espessura da mancha decresce até um determinado valor, o espalhamento termina. Mackay *et al.*(1980) recomendou um valor de 0.1 mm, valor este que foi utilizado no modelo ADIOS (NOAA, 1994). No modelo de Reed (1989) esse mesmo valor é utilizado para crudes pesados, enquanto que para as substâncias menos viscosas assume-se o valor de 0.01 mm.

Uma vez que as fórmulas de Fay subestimam a taxa de espalhamento para a fase gravítica-viscosa (pois não consideram o efeito do vento e a turbulência associada), surgiram algumas correcções empíricas. Lehr *et al.*(1989) propôs a seguinte formulação modificada de Fay:

$$A_s = 2270(\Delta V)^{2/3} t^{1/2} + 40(\Delta V)^{1/3} W^{4/3} t \quad (9)$$

em que W é a velocidade do vento em nós, V é o volume em barris, t é o tempo em minutos e A<sub>s</sub> é a área da mancha em m<sup>2</sup>.

Outra formulação modificada de Fay para o espalhamento na fase gravítica-viscosa foi proposta por Mackay *et al.*(1980) e utilizada em diversos modelos:

$$\frac{dA_s}{dt} = K_M A_s^{-1} V^{4/3} \quad (\text{S.I.}) \quad (10)$$

sendo  $K_M$  uma constante empírica com um valor de  $150 \text{ s}^{-1}$ .

#### 2.4.4 Evaporação

Este é um processo bastante importante, que ocorre desde o início do derrame. Quando o óleo é derramado, os componentes que possuem ponto de ebulição mais baixo (mais voláteis) são rapidamente volatilizados, reduzindo assim o volume e a massa da mancha que permanece na água. Durante as primeiras 24 horas após o derrame, a maior parte dos óleos-crude perdem aproximadamente 25-30% dos seus componentes mais leves. Os derrames de hidrocarbonetos mais leves podem ter o seu volume reduzido em 40% em poucas horas, apenas devido à evaporação (Costa, 1999). A evaporação destes componentes mais voláteis aumenta a densidade e viscosidade da mancha de óleo, podendo os compostos mais pesados continuar a sofrer outros processos de envelhecimento. A evaporação é, portanto, o primeiro processo envolvido na remoção de óleo da superfície da água. À medida que o óleo continua a envelhecer, e especialmente se se formarem emulsões água-no-óleo, a evaporação vai diminuindo progressivamente.

A taxa e extensão da evaporação dependem de diversos factores, tais como as fracções com baixo ponto de ebulição, área superficial e espessura da mancha, pressões de vapor do óleo e coeficiente de transferência de massa, que por seu turno são funções da composição do óleo, velocidade do vento, estado do mar e temperatura do ar e da água.

Diferentes algoritmos podem ser utilizados para o cálculo da taxa de evaporação. Entre os mais conhecidos encontram-se o modelo de pseudo-componentes (desenvolvido por Yang & Wang, 1977 e Payne *et al.*, 1984) e o modelo analítico, também conhecido como o modelo de exposição evaporativa (desenvolvido por Stiver & Mackay, 1984).

A aproximação de pseudo-componentes assume que os óleos-crude e os produtos refinados são constituídos por uma mistura de componentes discretos independentes, designados por pseudo-componentes, em que cada um deles é tratado como sendo uma substância singular com uma pressão de vapor associada. Os pseudo-componentes e o respectivo ponto de ebulição são geralmente determinados com base no método da destilação.

A taxa de evaporação volumétrica para cada pseudo-componente  $i$  pode ser calculada pela seguinte equação:

$$\frac{dV_e^i}{dt} = K_e^i \frac{P_i^{sat} \bar{V}_i}{RT} A_s \chi_i \quad (\text{S.I.}) \quad (11)$$

Em que  $V_e^i$  é o volume evaporado da fracção  $i$ ,  $t$  é o tempo,  $K_e^i$  é o coeficiente de transferência de massa,  $P_i^{sat}$  é a pressão de vapor da fracção considerada,  $R$  é a constante universal dos gases perfeitos,  $T$  é a temperatura do óleo,  $\bar{V}_i$  é o volume molar relativo da fracção  $i$ ,  $A_s$  é a área da mancha e  $\chi_i$  é a fracção molar do componente  $i$ . Por vezes, é utilizada alternativamente a fracção em volume.

O volume molar relativo de cada pseudo-componente é encontrado a partir de uma correlação entre o volume molar e o ponto de ebulição para uma série de alcanos (C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>):

$$\bar{V}_i = 7 \times 10^{-5} - (2.102 \times 10^{-7} \cdot BP_i) + (1 \times 10^{-9} \cdot (BP_i)^2) \quad (\text{S.I.}) \quad (12)$$

A pressão de vapor saturado de cada pseudo-componente pode ser determinada com base na equação de Antoine:

$$\ln \frac{P_i^{sat}}{P^0} = \frac{\Delta S_i (BP_i - C_{2,i})}{\Delta Z \cdot R \cdot BP_i} \cdot \left[ \frac{1}{BP_i - C_{2,i}} - \frac{1}{T - C_{2,i}} \right] \quad (\text{S.I.}) \quad (13)$$

em que  $P^0$  é a pressão atmosférica,  $\Delta S_i$  é a variação na entropia resultante da vaporização da fracção  $i$ ,  $\Delta Z$  é o factor de compressibilidade (assume-se que  $\Delta Z = 0,97$ ),  $BP_i$  é o ponto de ebulição do componente  $i$ , e  $C_{2,i}$  é um coeficiente empírico. Assim,

$$\Delta S_i = 8.75 + 1.987 \log(BP_i) \quad (\text{S.I.}) \quad (14)$$

$$C_{2,i} = 0.19 \cdot BP_i - 18 \quad (\text{S.I.}) \quad (15)$$

O coeficiente de transferência de massa pode assumir diferentes formulações. Segundo Mackay e Matsugu (1973):

$$K_e^i = 0.029 W^{0.78} D_s^{-0.11} S_c^{-0.67} \sqrt{\frac{M_i + 29}{M_i}} \quad (16)$$

em que nesta equação  $W$  é a velocidade do vento em  $\text{m} \cdot \text{h}^{-1}$ ,  $D_s$  é o diâmetro da mancha (m),  $S_c$  é o número de Schmidt para a fracção  $i$  (adimensional) e  $M_i$  é a massa molar de cada fracção ( $\text{Kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ ). As unidades de  $K_e^i$  são, portanto, em  $\text{m} \cdot \text{h}^{-1}$ .

Mais tarde Buchanan & Hurford (1988) propuseram uma formulação mais simples:

$$K_e = 2.5 \times 10^{-3} W^{0.78} \quad (\text{S.I.}) \quad (17)$$

O valor de  $2.5 \times 10^{-3}$  não é consensual em toda a literatura, podendo variar entre  $1.5 \times 10^{-3}$  e  $5.0 \times 10^{-3}$ .

No modelo ADIOS 2 (NOAA, 2000), o coeficiente de transferência da massa é determinado com base na formulação de Mackay e Matsugu, mas utilizando um único valor para o número de Schmidt baseado na massa molar média do óleo, e a velocidade do vento em  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ :

$$K_e = 0.0048 \cdot W^{0.78} \cdot \left( \sqrt{\frac{4 \cdot A_s}{\pi}} \right)^{-0.11} \cdot \left[ 1.3676 \cdot \left( \sqrt{\frac{0.018}{M_i}} \right)^{0.67} \right] \quad (\text{S.I.}) \quad (18)$$

O método da exposição evaporativa pode ser expresso por:

$$\frac{dF_e}{dt} = \frac{K_e A_s}{V_0} \cdot \exp \left( A - \frac{B}{T} (T_0 + T_G F_e) \right) \quad (\text{S.I.}) \quad (19)$$

$F_e$  é a fracção volúmica de óleo evaporado  $A$  e  $B$  são constantes empíricas,  $T_0$  é o ponto de ebulição inicial e  $T_G$  é o gradiente da curva de destilação. Todas estas propriedades dependem do tipo de óleo. Caso estes valores sejam desconhecidos, poderão ser aproximados, sendo  $T_0$  e  $T_G$  estimados com base na densidade  $API$ , de acordo com a versão 1.1 do modelo ADIOS (NOAA, 1994):

A = 6.3 B = 10.3

Para óleos-crude:

$$T_0 = 532.98 - 3.1295 \cdot API \quad (\text{S.I.}) \quad (20)$$

Para produtos refinados:

$$T_0 = 654.45 - 4.6588 \cdot API \quad (\text{S.I.}) \quad (21)$$

$T_G$ , na versão 2 do ADIOS (NOAA, 2000) é determinado da seguinte forma:

$$T_G = 1356.7 - 247.36 \cdot \ln(API) \quad (22)$$

O método dos pseudo-componentes fornece resultados bastante razoáveis, no entanto requer maior informação sobre o óleo. Para além disso, o facto das fracções serem determinadas com base na temperatura de destilação poderá conduzir a alguns desvios à realidade, uma vez que compostos diferentes podem possuir a mesma temperatura de ebulição, como por exemplo alcanos, naftenos e aromáticos.

Quanto ao método da exposição evaporativa, este não requer informação sobre a composição do óleo. Contudo, os resultados obtidos podem ser bastante falíveis para óleos com curvas de destilação não-lineares, como os produtos refinados.

## 2.4.5 Dispersão

A dispersão vertical é um processo físico em que as gotículas de óleo são transportadas a partir da superfície do mar para a coluna de água, sobretudo devido à rebentação das ondas. Essas gotículas podem ter dimensões variáveis, sendo que as mais pequenas não voltam à superfície devido à turbulência natural da água, difundindo-se na coluna de água.

Este processo é influenciado por três factores essenciais: viscosidade do óleo, temperaturas da água e do ar e estado do mar.

Quanto maior for a viscosidade do produto, maior é a possibilidade de se formarem espessas camadas de óleo na superfície da água, e assim diminuir a dispersão do mesmo na água, ao contrário dos hidrocarbonetos menos viscosos que facilmente se podem dispersar completamente ao fim de alguns dias.

As temperaturas da água e do ar também podem inibir a dispersão, caso sejam inferiores ao ponto de fluidez.

O estado do mar é associado à energia da rebentação das ondas. Assim, em derrames de óleo durante tempestades, a dispersão poderá ser o principal mecanismo de remoção de óleo da superfície, enquanto que em condições meteorológicas normais a evaporação será mais significativa, apesar da dispersão poder continuar a ter alguma relevância.

Estudos mais recentes demonstraram que a presença de quantidades significativas de asfaltenos retardam o processo de dispersão do óleo (Fingas *et al.*, 1993).

Delvigne & Sweeney (1988) desenvolveram uma série de estudos laboratoriais acerca da dispersão natural do óleo. Com base nos resultados experimentais obtidos, desenvolveram uma relação empírica para a taxa de dispersão do óleo para a coluna de água devida à rebentação das ondas:

$$\frac{dm_d}{dt} = C_{oil} \cdot D_{ba}^{0,57} \cdot f_s \cdot F_{wc} \cdot d_0^{0,7} \cdot \Delta d \quad (\text{S.I.}) \quad (23)$$

em que  $f_s$  é a fracção de superfície coberta por crude (igual ao conteúdo de óleo na emulsão óleo+água);  $d_0$  é o diâmetro das partículas;  $\Delta d$  é o intervalo de diâmetros das partículas;  $C_{oil}$  é um parâmetro determinado experimentalmente, e que depende do tipo de óleo e  $D_{ba}$  é a energia de dissipação das ondas por unidade de área superficial, que pode ser calculada da seguinte forma:

$$D_{ba} = 0.0034 \rho_w g H_{rms}^2 \quad (\text{S.I.}) \quad (24)$$

$H_{rms}$ , é determinada por:

$$H_{rms} = \frac{1}{\sqrt{2}} H_0 \quad (\text{S.I.}) \quad (25)$$

sendo  $H_0$  a altura da onda.

$F_{wc}$  é a fracção de superfície de mar atingida pela rebentação das ondas por unidade de tempo, dada por:

$$F_{wc} = \frac{C_b (W - W_i)}{T_w} \quad (\text{S.I.}) \quad (26)$$

onde  $C_b = 0,032 \text{ s.m}^{-1}$  e  $W_i$  é a velocidade do vento para iniciar o rompimento ( $5 \text{ m.s}^{-1}$ ).  $T_w$  é o período da onda.

Caso a altura e período de onda não sejam conhecidos, estes poderão ser determinados empiricamente, com base na velocidade do vento, de acordo com a formulação utilizada no modelo ADIOS (NOAA, 1994):

$$H_0 = 0.243 \frac{W^2}{g} \quad (\text{S.I.}) \quad (27) \quad \text{e} \quad T_w = 8.13 \frac{W}{g} \quad (\text{S.I.}) \quad (28)$$

Uma vez que a energia turbulenta é de difícil determinação, existem outros algoritmos simplificados que parametrizam o processo de dispersão em função do quadrado da velocidade do vento. Entre eles, encontra-se a formulação utilizada por Mackay *et al.* (1980):

$$\frac{dm_d}{dt} = 0.11 m_{oil} \frac{(1+W)^2}{1+50\mu^{1/2} h \sigma} \quad (29)$$

Esta formulação determina a taxa de transferência de massa por hora, em que  $m_{oil}$  é a massa de óleo que permanece à superfície,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do óleo (cP),  $h$  é a espessura da mancha (cm) e,  $W$  é a velocidade do vento ( $\text{m.s}^{-1}$ ) e  $\sigma$  é a tensão interfacial óleo-água ( $\text{dyne.cm}^{-1}$ ).

## 2.4.6 Sedimentação

Parte do petróleo acaba por se sedimentar frequentemente associado a matéria em suspensão na coluna de água, originando um aumento da massa volúmica e consequentemente o movimento descendente das partículas na coluna de água até ao fundo do mar.

Outros fenómenos podem originar o aumento da massa volúmica das manchas de petróleo e/ou das gotículas presentes na coluna de água e consequente sedimentação: processos de envelhecimento do petróleo (evaporação, dissolução e emulsificação) e incorporação nas fezes de organismos que ingerem o petróleo. Qualquer destes fenómenos é menos importante para a sedimentação, do que agregação das partículas de hidrocarbonetos à matéria em suspensão, embora certos crudes mais densos que a água possam afundar-se por natureza e assim sedimentar.

Assim, a concentração de partículas de óleo e de matéria em suspensão na água são decisivas para a ocorrência de sedimentação. Por conseguinte, a maior concentração de partículas em suspensão existente nas zonas costeiras torna o processo de sedimentação mais importante junto à costa, embora este processo seja em geral, pouco importante nos primeiros dias.

O processo de sedimentação de petróleo é relativamente complicado, e de difícil contabilização.

A próxima formulação foi proposta pela Science Applications International (Payne *et al.*, 1987) e é utilizada no modelo ADIOS2 (NOAA, 2000):

$$\frac{dm_{sed}}{dt} = 1.3 \sqrt{\frac{E}{V_w}} K_a \cdot C_{oil} \cdot C_{sed} \cdot z_i \cdot A_s \quad (S.I.) \quad (30)$$

Esta equação fornece a massa de óleo sedimentado por unidade de tempo ( $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ ), em que:

$V_w$  é a viscosidade dinâmica da água ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ );  $K_a$  é o parâmetro de adesão, que toma o valor de  $1 \times 10^{-4} \text{ m}^3\cdot\text{kg}^{-1}$ ;  $z_i$  é a profundidade de intrusão das partículas de óleo na coluna de água devido à rebentação das ondas, dada por Delvigne & Sweeney (1988), dada por:

$$z_i = 1.5 \cdot H_0 \quad (S.I.) \quad (31)$$

$E$  é a taxa de energia dissipada da superfície da água ( $\text{J}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ ). Pode ser estimada a partir da energia de dissipação das ondas ( $D_{ba}$ ) explicada na secção da dispersão, através de:

$$E = \frac{D_{ba}}{z_i \cdot T_w} \quad (S.I.) \quad (32)$$

$C_{sed}$  é a concentração de sedimentos na coluna de água ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ), enquanto que  $C_{oil}$  é a concentração de partículas de óleo na coluna de água ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ). Apenas as gotículas com mais de 70 micrón são consideradas, uma vez que as restantes não flutuarão, sendo assim removidas da mancha, quer adiram ou não aos sedimentos. Esta concentração pode ser determinada através da taxa de dispersão proposta por Delvigne & Sweeney (1988) (explicada na secção da dispersão)



para partículas com diâmetro superior a 70 micron, e integrando essa taxa para o período de onda e a profundidade de intrusão das partículas de óleo:

$$C_{oil} = \frac{dm_d}{Z_i \cdot T_w} \quad (S.1.) \quad (33)$$

### 2.4.7 Emulsificação

A formação de emulsões não é mais do que a dispersão de pequenas gotículas de um líquido dentro de outro. Pode-se, assim, estar na presença de dois tipos de emulsões: óleo-na-água – que acaba por ser o processo de dispersão já referido – e água-no-óleo, também designada por formação de mousse, em que as gotas de óleo estão dispersas na água, formando uma emulsão estável e persistente. Uma emulsão estável e totalmente emulsificada pode conter 80 a 90% de água.

O processo de formação de mousse parece estar bem documentado, contudo a informação relativamente à cinética do processo no mar e à modelação é escassa, embora este seja um mecanismo importante para o envelhecimento do petróleo.

A tendência de formação e estabilidade das emulsões água-no-óleo parecem ser função do conteúdo em asfaltenos e parafinas do petróleo. Daí que a maior parte dos produtos refinados não formem emulsões água-no-óleo estáveis devido à ausência de parafinas e asfaltenos. A mínima percentagem de massa, de asfaltenos e de parafinas, para estabilizar uma emulsão é de cerca de 3% (Fingas *et al.* 1996). Estes compostos estão estabilizados em muitos óleos-crude pelos solventes aromáticos. Assim, à medida que processos como a evaporação e foto-oxidação eliminam os solventes aromáticos, o conteúdo de asfaltenos e parafinas no petróleo altera-se e estes compostos começam a precipitar, reduzindo a tensão superficial da interface óleo-água e originando o processo de emulsificação, sendo que as gotículas de água, após se dispersarem na fase do óleo, ficam estabilizadas pelos asfaltenos e parafinas precipitados.

É, pois, comum que a maioria dos óleos-crude só inicie a emulsificação após uma certa fase de envelhecimento. A ocorrência deste processo, para além de depender da composição do petróleo, depende também do estado do mar, sendo que a formação de emulsões é favorecida na presença de mar agitado.

A emulsificação é considerada muitas vezes como o 2º processo mais importante, logo após a evaporação, devido ao efeito significativo que o mesmo tem no comportamento das manchas de petróleo no mar. A formação de emulsões ou mousse normalmente provoca um aumento da viscosidade de cerca de 1000 vezes, e diminui o espalhamento e a evaporação, e devido à sua estabilidade e persistência, retardam a sua eliminação, inibindo algumas reacções químicas e biológicas, uma vez que reduzem as áreas expostas ao ar e à água.

Ao nível das operações de remoção e limpeza, o processo também é dificultado, quer ao nível do maior volume de produto a ser removido, quer ao nível da menor eficiência com que os equipamentos recolhem o petróleo nas circunstâncias consideradas.

Após o início da emulsificação, a incorporação de água no óleo pode ser descrita por uma equação proposta por Mackay *et al.* (1980), e largamente utilizada em modelos de envelhecimento de petróleo:

$$\frac{dF_{wv}}{dt} = K_w (1+W)^2 \left( 1 - \frac{F_{wv}}{F_{wv}^{final}} \right) \quad (\text{S.I.}) \quad (34)$$

,em que  $F_{wv}$  é a fracção volúmica de água incorporada na emulsão;  $F_{wv}^{final}$  é a fracção volúmica final de água incorporada na emulsão

$K_w$  - constante empírica, que no modelo ADIOS (NOAA, 1994) assume o valor de  $1.6 \times 10^{-6}$

Outra formulação menos conhecida, mas que tem em conta algumas propriedades do óleo, é a equação de Rasmussen (1985)

$$\frac{dF_{wv}}{dt} = R_1 - R_2 \quad (\text{S.I.}) \quad (35)$$

sendo:

$R_1$  - taxa de entrada de água ( $s^{-1}$ ), dada por:

$$R_1 = \frac{K_1}{\mu_0} (1+W)^2 (F_{wv}^{final} - F_{wv}) \quad (36)$$

$R_2$  - taxa de saída de água ( $s^{-1}$ ), dada por:

$$R_2 = \frac{K_2}{Asph \cdot Wax \cdot \mu_0} F_{wv} \quad (37)$$

$Asph$  é o conteúdo de asfaltenos no óleo (%),  $Wax$  é o conteúdo de parafinas (%), e  $K_1$  e  $K_2$  são constantes determinadas experimentalmente por Rasmussen (1985) :  $K_1 = 5 \times 10^{-7} \text{ kg.m}^{-3}$   $K_2 = 1.2 \times 10^{-7} \text{ kg.m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$ .

## 2.4.8 Dissolução

A dissolução é o processo através do qual os hidrocarbonetos solúveis se fragmentam em partículas pequeníssimas, misturando-se com a água e originando uma massa líquida homogénea entre ambos. A reduzida presença de hidrocarbonetos solúveis no petróleo resulta numa baixa perda de hidrocarbonetos por dissolução, quando comparado com outros processos.

A dissolução ocorre nos hidrocarbonetos de menor peso molecular, sendo estes também mais solúveis e mais voláteis, e tanto pode ter origem directamente na mancha superficial como nas gotículas de petróleo presentes na coluna de água. A dissolução e a evaporação são dois processos competitivos. Para manchas superficiais, uma vez que as pressões parciais tendem a exceder as solubilidades dos compostos de menor peso molecular, verifica-se uma predominância de massa evaporada relativamente à dissolução.

Embora após o derrame da mancha, inicialmente a dissolução aumente, após alguns minutos verifica-se um rápido decréscimo, devido às perdas por evaporação. Dados experimentais demonstram que após cerca de 15 minutos de

contacto com a água o processo de solubilização parece estar concluído. A solubilidade pode variar entre 1 e 100 ppm (Fingas *et al.*, 1996).

A dissolução é particularmente importante em superfícies cobertas de gelo ou em gotas de petróleo dispersas na coluna de água, ou seja, onde a evaporação é reduzida. Para as condições referidas, a menor exposição atmosférica e em particular para as gotas dispersas a maior área superficial por unidade de volume justificam o acréscimo de importância da dissolução relativamente à evaporação. A dissolução varia, portanto, com diversos factores, entre os quais, a facilidade de dispersão e espalhamento dos hidrocarbonetos, a sua composição, temperatura da água e agitação marítima.

Este processo pode ser quantificado através do método de Cohen *et al.* (1980). Neste método, a taxa de dissolução é calculada através de:

$$\frac{dDiss}{dt} = K \cdot f_s \cdot A_s \cdot S \text{ (g.h}^{-1}\text{)} \quad (38)$$

,em que  $f_s$  é a fracção de superfície coberta por crude (igual ao conteúdo de óleo na emulsão óleo+água);  $A_s$  é a área da mancha de óleo (m<sup>2</sup>) e  $S$  é a solubilidade do óleo na água. Huang & Monastero (1982) propuseram que para um óleo típico, a solubilidade pode ser calculada através de:

$$S = S_0 \cdot e^{\alpha t} \quad (39)$$

,em que  $S_0$  é a solubilidade do óleo "fresco" (30 g.m<sup>3</sup>);  $\alpha$  é a constante de decaimento (0.1);  $t$  é o tempo após o derrame (h) e  $K$  é o coeficiente de transferência de massa por dissolução (0.01m.h<sup>-1</sup>)

## 2.4.9 Degradação

A degradação do petróleo pode ocorrer como resultado da luz solar (oxidação fotoquímica) ou através de acção biológica (biodegradação).

### 2.4.9.1 Oxidação Fotoquímica

A oxidação fotoquímica do petróleo é o processo químico através do qual se dá a degradação do mesmo devido à acção da radiação ultravioleta do sol (fotólise), em que há uma transformação de alguns componentes químicos do petróleo em componentes polares através da adição de oxigénio, aumentando a hidrossolubilidade dos hidrocarbonetos, sendo mais facilmente degradados. Esta reacção ocorre na superfície da mancha de petróleo, sendo por isso acelerada por um maior espalhamento. Contudo, a oxidação fotoquímica é um processo lento, já que a penetração de oxigénio é muito reduzida.

Outros factores podem condicionar a taxa de oxidação do petróleo, tais como a espessura da mancha, a presença de sais minerais dissolvidos na água, composição do petróleo, incluindo presença de metais, e quantidade de radiação com comprimento de onda inferior a 400 nm, latitude do derrame. Em algumas áreas com maior incidência de radiação (como o Ártico no Verão) o processo de foto-oxidação poderá ser significativo. Porém, nos primeiros dias o processo é pouco importante, tornando-se significativo a partir da primeira semana.

A oxidação fotoquímica, ao transformar alguns componentes químicos do petróleo em componentes polares, aumenta a fracção de resinas e asfaltenos (estes em menor escala) no petróleo. Assim, é provável que seja potenciada a formação de

emulsões (que é influenciada pelo conteúdo em resinas e asfaltenos no petróleo). Contudo, esta é uma matéria ainda pouco estudada, pelo que a previsão do grau de foto-oxidação e quantificação da sua influência sobre a formação de emulsões são áreas ainda um pouco desconhecidas.

### 2.4.9.2 -Biodegradação

A biodegradação ocorre quando microorganismos são responsáveis pela transformação de hidrocarbonetos em compostos mais simples – é a chamada oxidação bioquímica. Existem várias algas, bactérias e fungos responsáveis por este processo, existindo estes em maior quantidade em águas contaminadas com descargas de esgotos não tratados, por exemplo.

Este processo será mais significativo, quanto maior for a extensão da superfície do derrame em contacto com a água e as bactérias, maior temperatura, maior disponibilidade de nutrientes (fósforo e azoto) e oxigénio. A composição dos hidrocarbonetos também é importante, uma vez que a biodegradação é mais relevante nas fracções leves. Assim, o espalhamento, a dispersão e a dissolução facilitam a ocorrência da biodegradação.

Porém a redução de hidrocarbonetos por este processo bioquímico é insignificante quando comparada com as perdas por evaporação ou dispersão, por exemplo, sobretudo nos primeiros dias após o derrame, uma vez que a biodegradação é um processo muito lento e em pequena escala.

## 2.5 PRINCIPAIS MÉTODOS DE RESPOSTA A UM DERRAME DE PETRÓLEO

Estão disponíveis vários mecanismos de resposta para controlar derrames de óleo e minimizar os seus impactes. A chave para um combate eficaz aos derrames consiste numa selecção cuidadosa e utilização adequada do equipamento e materiais para o tipo de óleo e as condições no local do derrame. A maior parte dos materiais e equipamentos utilizados são fortemente afectados por diversos factores tais como as condições de no mar, correntes e vento. Os danos provocados a linhas costeiras ou outras zonas sensíveis podem ser reduzidos por uma aplicação apropriada e em tempo útil dos equipamentos de contenção e remoção.

As duas técnicas mais utilizadas na resposta a derrames de óleo são a aceleração da dispersão vertical através da utilização de dispersantes químicos, e a recuperação mecânica com barreiras flutuantes de retenção e recolha, skimmers e materiais absorventes.

Contudo, técnicas alternativas continuam a ser procuradas e investigadas, com especial destaque para a queima in-situ e o desenvolvimento de biodegradação natural do óleo mediante a aplicação de microorganismos e/ou nutrientes (biorremediação)

## 3 Modelo de Derrames de Hidrocarbonetos

### 3.1 INTEGRAÇÃO NO SISTEMA MOHID

O modelo desenvolvido para prever o transporte, espalhamento e envelhecimento de produtos petrolíferos derramados em zonas costeiras ou no mar está integrado no sistema de modelos MOHID, originalmente desenvolvido no Instituto Superior Técnico. O sistema MOHID é programado recorrendo a programação orientada por objectos, utilizando o *ANSI FORTRAN 95*.

A divisão do sistema é feita em módulos capazes de, para além da hidrodinâmica, simular fenómenos de dispersão (abordagens lagrangeana e eulereana), qualidade da água e transporte de sedimentos (coesivos e não coesivos), podendo cada módulo ser entendido com um modelo, sendo no entanto o sistema composto por um único executável.

O MOHID 2000 é constituído por mais de 40 módulos, que no total completam cerca 140 mil linhas de código. Cada módulo é responsável por uma tarefa específica. Estes módulos podem-se dividir em 4 grandes tipos: os módulos que estão relacionadas com a descrição da malha computacional, os módulos que gerem a entrada e saída de dados numéricos, os módulos que são responsáveis pelas condições de fronteira do modelo e por último os módulos que modificam os variáveis de estado do modelo.

### 3.2 CARACTERÍSTICAS GERAIS DO MODELO

A trajectória do óleo derramado é calculada com base num modelo de traçadores, assumindo que o óleo pode ser considerado um largo conjunto de partículas que se desloca por advecção, difusão turbulenta e espalhamento específico do óleo. Assim, o sistema desenvolvido para a previsão e simulação de derrames de óleo baseia-se fundamentalmente em três sub-modelos: um modelo responsável pela evolução de todas as propriedades e processos específicos do petróleo (densidade, velocidades de espalhamento, evaporação, etc.); um modelo hidrodinâmico que calcula o campo de velocidades das correntes induzidas pela maré ou vento nas zonas de interesse; e um modelo lagrangeano que calcula a evolução espacial das partículas de petróleo com base nas velocidades das correntes (calculadas pelo módulo hidrodinâmico), de deriva devida ao vento, do espalhamento do petróleo (determinada no módulo do petróleo), e ainda da velocidade aleatória representativa do transporte difusivo. A Figura 2 apresenta de uma forma esquemática a estrutura do modelo de previsão para derrames de óleo

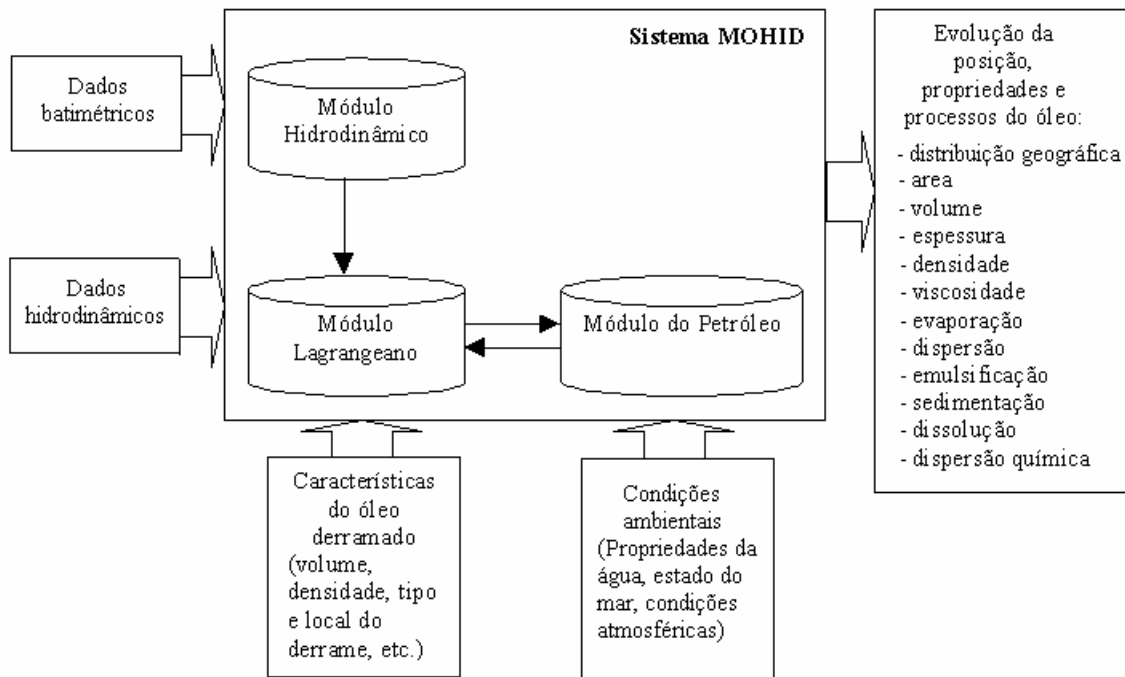


Figura 2 - Diagrama esquemático do funcionamento do modelo de previsão para derrames de óleo

### 3.3 MÓDULO HIDRODINÂMICO

O módulo hidrodinâmico do sistema MOHID gera e actualiza a informação do escoamento, resolvendo as equações primitivas do movimento no espaço tridimensional para fluidos incompressíveis. Assume-se o equilíbrio hidrostático, bem como a aproximação de Boussinesq. A discretização espacial destas equações é feita utilizando uma técnica de volumes finitos a qual permite a utilização de um sistema de coordenadas verticais genérico. A discretização temporal é baseada na utilização de um esquema semi-implícito.

A versatilidade do módulo hidrodinâmico permite que se proponha esta como a única ferramenta para simular o escoamento em todos os locais onde poderão ser elaborados cenários de derrames independentemente da complexidade da respectiva geometria.

Em anexo é apresentada uma explicação pormenorizada deste módulo.

### 3.4 MÓDULO LAGRANGEANO

O módulo lagrangeano é um modelo de transporte lagrangeano tridimensional que simula a evolução espacial das partículas. Este modelo pode correr em simultâneo com o modelo hidrodinâmico, obtendo o campo de velocidades do modelo hidrodinâmico em cada instante de cálculo, ou *a posteriori*, utilizando um campo hidrodinâmico gravado em arquivo.

Consideram-se como processos de transporte todos os processos que resultam numa translação das partículas de uma mancha derramada, por movimentação dos dois meios envolvidos: ar e água.

Assim, a evolução espacial das partículas de petróleo é calculada a partir da definição da velocidade:

$$\frac{dx_i}{dt} = U_i(x_i, t) \quad (41)$$

em que a velocidade  $U$  pode ser obtida através das seguintes componentes:

- velocidade da corrente obtida do módulo hidrodinâmico;
- velocidade de deriva devida ao vento;
- velocidade aleatória representativa do transporte difusivo;
- velocidade devido ao espalhamento da manchas de petróleo, obtida modulo do petróleo.

A velocidade de deriva devida ao vento é, por defeito, 3% do vector da velocidade do vento 10 m acima do nível do mar (na literatura o coeficiente de deriva do vento varia entre 2 e 4%).

O efeito das vagas e ondulação é desprezado para efeitos de transporte, devido à sua natureza auto-cancelativa e quando comparado com os restantes, enquanto a força de Coriolis é contabilizada na velocidade da corrente.

A área total ocupada pela mancha é calculada somando as áreas das células onde existe pelo menos uma partícula (centro de massa). O volume de cada partícula é o volume total a dividir pelo número de partículas. A espessura média de petróleo numa célula do modelo hidrodinâmico é obtida dividindo a soma do volume de partículas cujo centro de massa está dentro dessa célula pela área da mesma.

Em cada iteração do modelo algumas partículas podem desaparecer devido a saírem do domínio, darem à costa, etc.

Em relação ao passo temporal do modelo lagrangeano, este é independente do utilizado no modelo hidrodinâmico, sendo assim possível correr o modelo da deriva com um passo do tempo superior ao modelo hidrodinâmico, aumentando a performance do sistema MOHID.

A emissão das partículas pode ser feita de várias maneiras, tanto ao nível espacial com ao nível temporal. A emissão espacial pode ser feita por uma ou várias origens em que cada origem pode corresponder a uma emissão pontual ou uma área definida por um polígono.

A emissão temporal pode ser do tipo instantâneo, do tipo contínuo ou do tipo série temporal. A emissão temporal em série temporal é especialmente adequada para simular situações de acidentes, como acontece em derrames de petróleo, em que a quantidade de petróleo emitido pode variar ao longo do tempo. Para cada origem, o modelo permite definir as características do petróleo descarregado.

Em anexo encontram-se mais especificações técnicas do modelo lagrangeano do sistema MOHID, nomeadamente sobre o deslocamento dos traçadores, termo difusivo, o deslocamento aleatório, emissão dos traçadores e condições de fronteira.

### 3.5 MÓDULO DO PETRÓLEO

O módulo do petróleo prevê a evolução nos primeiros dias de todas as propriedades e processos envolvidos num produto petrolífero derramado na água. Estão também implementados algoritmos referentes à aplicação de algumas técnicas de

remoção e limpeza do produto derramado. Uma explicação mais aprofundada do funcionamento interno deste módulo é efectuado no manual técnico do módulo do petróleo (anexo 8)

A simulação é feita para o conjunto das partículas, ou seja, são realizados os cálculos para a mancha de petróleo no seu conjunto, e não para cada uma das partículas individualmente (como acontece no módulo lagrangeano), à excepção do processo de espalhamento, em que são calculadas velocidades variáveis com a posição espacial das partículas – como será visto mais à frente.

Refira-se que a previsão, tendo em conta os processos modelados, só é válida para um período aproximado de 5 dias, uma vez que para períodos maiores há que ter em conta outros processos como a biodegradação e foto-oxidação, que não são simulados neste modelo.

O modelo permite a utilização de diversa informação relativa a condições ambientais e propriedades da água de forma variável no espaço e no tempo. Uma vez que a evolução das propriedades e processos do petróleo (exceptuando o espalhamento) são resolvidas assumindo um comportamento homogéneo do petróleo, as condições ambientais e propriedades da água também são consideradas constantes em qualquer parte da mancha, num determinado instante. O valor assumido para essas mesmas condições ambientais é aquele que é registado na origem do acidente.

Assume-se que a temperatura da mancha de óleo após o derrame rapidamente iguala a temperatura da água, desprezando efeitos da radiação solar ou qualquer outro processo de transferência de energia.

À excepção da foto-oxidação e biodegradação, bem como das equações (9) de Mackay *et al.* (1980) e (10) Lehr *et al.* (1989) para o espalhamento, são simulados todos os processos e respectivas equações abordados no capítulo 2.4. Assim, para diversos processos existem duas formulações diferentes, existindo a possibilidade de utilizar formulações alternativas para os casos em que os resultados sejam afastados do esperado. Qualquer um dos processos programados pode ser desactivado pelo utilizador.

### 3.5.1 Espalhamento

Assim, no que respeita ao espalhamento do óleo, um dos algoritmos determina velocidades aleatórias  $u_d$  e  $v_d$  (com distribuição uniforme) dentro dos intervalos  $[-U_r, U_r]$ ,  $[-V_r, V_r]$  (respectivamente nas direcções  $x$  e  $y$ ) proporcionais aos coeficientes de difusão, estes calculados assumindo que o espalhamento dos traçadores lagrangeanos é equivalente à solução dada pelas fórmulas de Fay (1969) (descrito na secção 2.4). A relação entre os coeficientes de difusão  $D_x$ ,  $D_y$  e os intervalos de flutuação de velocidades  $[-U_r, U_r]$ ,  $[-V_r, V_r]$  é a seguinte, de acordo com Leitão (1996):

$$U_r = \sqrt{\frac{2D_x}{\Delta t}} \quad (41),$$

$$V_r = \sqrt{\frac{2D_y}{\Delta t}} \quad (42)$$

As velocidades aleatórias são então determinadas da seguinte forma, como sugerido por Proctor *et al.*(1994):

$$u_d = R_1 \cos(2\pi R_2) \cdot U_r \quad (43),$$

$$v_d = R_1 \sin(2\pi R_2) \cdot V_r \quad (44)$$



, em que  $R_1$  e  $R_2$  são números gerados aleatoriamente entre 0 e 1.

De acordo com a explicação feita na secção 2.4, apenas é simulada a fase gravítica-viscosa. Assume-se que a área inicial é a área ocupada pela mancha no final da 1ª fase (gravítica-inércia).

Para além da equação proposta por Fay, foi introduzido no modelo um novo algoritmo, devido às reconhecidas limitações do método de Fay (como foi descrito no capítulo 2.4). Esse novo algoritmo baseia-se nas diferenças de espessura dentro da mancha de óleo, e no pressuposto que a existência de um gradiente de espessura provoca uma “força de espalhamento” no sentido da espessura menor. Desta forma uma partícula que se encontre sujeita ao gradiente de espessura mover-se-á no sentido da célula em que a espessura média do petróleo é menor.

Esta nova formulação, contudo, para poder responder adequadamente aos diferentes comportamentos dos diferentes óleos, utiliza um coeficiente baseado no coeficiente de difusão de Fay para a fase gravítica-viscosa. Uma vez que, como foi visto no método anterior,

$$u_d \approx \sqrt{D_x} \quad (45) \quad \text{e} \quad v_d \approx \sqrt{D_y} \quad (46)$$

o coeficiente para o espalhamento é o seguinte:

$$k = k_1 \cdot \sqrt{\left(\frac{\Delta g V^2}{V_w^{1/2}}\right)^{1/3}} \quad (47)$$

, sendo o valor de  $k_1$  de 5.0, obtido após calibração.

Assim, no módulo do petróleo são calculadas as velocidades nas faces das células ocupadas pela mancha, nas direcções  $x$  e  $y$ , da seguinte forma:

$$u_{cell} = k \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} \quad (48) \quad \text{e} \quad v_{cell} = k \cdot \frac{\Delta h}{\Delta y} \quad (49)$$

, em que  $\frac{\Delta h}{\Delta x}$  e  $\frac{\Delta h}{\Delta y}$  são os gradientes de espessura de uma determinada célula, nas direcções  $x$  e  $y$ . Posteriormente no

módulo lagrangeano são determinadas as velocidades das partículas, através de interpolações com base nas velocidades nas faces das células, e na posição das partículas, como é referido no anexo sobre o módulo lagrangeano.

Refira-se ainda que, embora na realidade o ponto de corrimento (menor temperatura à qual o óleo flui para determinadas condições, como é referido no anexo referente às propriedades e características dos hidrocarbonetos) aumente com a idade do óleo derramado, esta propriedade não é modelada. Caso o derrame seja feito a uma temperatura da água superior ao ponto de corrimento inicial, o modelo avisa o utilizador que os resultados poderão ser irrealistas, mas realiza os cálculos da mesma forma, visto que existe uma grande incerteza no valor exacto do ponto de corrimento (NOAA, 2000).

### 3.5.2 Restantes processos

Como já foi referido, todos os processos (exceptuando o espalhamento) e propriedades calculados para o petróleo são modelados de acordo com as equações apresentadas na secção 2.4.

A densidade inicial do óleo é obtida a partir da densidade API (ver o anexo referente às características e propriedades dos hidrocarbonetos). Só são modelados produtos derramados com uma densidade inferior à da água, visto que os restantes afundar-se-ão.

Na evaporação, para o método dos pseudo-componentes utiliza-se o coeficiente de transferência de massa definido no modelo ADIOS 2 (NOAA, 2000) (equação 18), enquanto que no método da exposição evaporativa é utilizado o coeficiente proposto por Buchanan e Hurford (1988) (equação 17).

Para a dispersão, no método de Delvigne & Sweeney (1988), considera-se que a dispersão na coluna de água só é válida para partículas com diâmetro inferior a 70 micron, enquanto que as partículas maiores tenderão a regressar à superfície (NOAA, 1994).

Da mesma forma, para o processo de sedimentação (adesão das partículas de óleo aos sedimentos), o maior diâmetro considerado para aderir aos sedimentos é de 200 micron, porque gotículas maiores são menos frequentes e menos prováveis de aderir à matéria em suspensão.

O algoritmo da formação de emulsões água-no-óleo utiliza uma constante de emulsificação, que significa a percentagem de óleo que evapora antes de se iniciar o processo de emulsificação. No entanto, existem bastantes produtos petrolíferos para os quais a informação relativa ao início deste processo é desconhecida.

### 3.5.3 Técnicas de remoção

O modelo criado permite também a integração de algumas técnicas de remoção da mancha da superfície, nomeadamente a aplicação de dispersantes químicos e a remoção mecânica através de skimmers.

A aplicação de dispersantes químicos pode ser modelada desde que seja conhecida a eficiência do dispersante, a percentagem da mancha pulverizada, bem como o período de aplicação.

A simulação da remoção mecânica do óleo é realizada também para um determinado período, sendo removido um caudal ou um volume de emulsão pré-definido.

## 4 Validação do Modelo

Para poder simular derrames com alguma fiabilidade, é necessário desenvolver diversos testes e análises de sensibilidade, de modo a avaliar as qualidades e limitações do modelo desenvolvido.

A falta de dados de campo, no que diz respeito a derrames de hidrocarbonetos, dificulta a validação do modelo.

### 4.1 ESPALHAMENTO

A primeira fase de testes concentrou-se no espalhamento, principalmente porque muitos dos processos de envelhecimento do petróleo são directamente influenciados pela evolução da área ocupada pela mancha.

#### 4.1.1 Sem hidrodinâmica

Assim, estes testes foram desenvolvidos num tanque fechado e com profundidade uniforme, sem qualquer hidrodinâmica, e sem envelhecimento do produto derramado. A malha de cálculo apresenta um passo espacial de 25m. Foram analisados diversos óleos (as suas propriedades estão descritas em anexo – 8) para diferentes volumes, de modo a averiguar a sensibilidade do modelo. Na Figura 3 apresenta-se o espalhamento para o óleo Statfjord em diferentes instantes, e para os dois algoritmos programados.

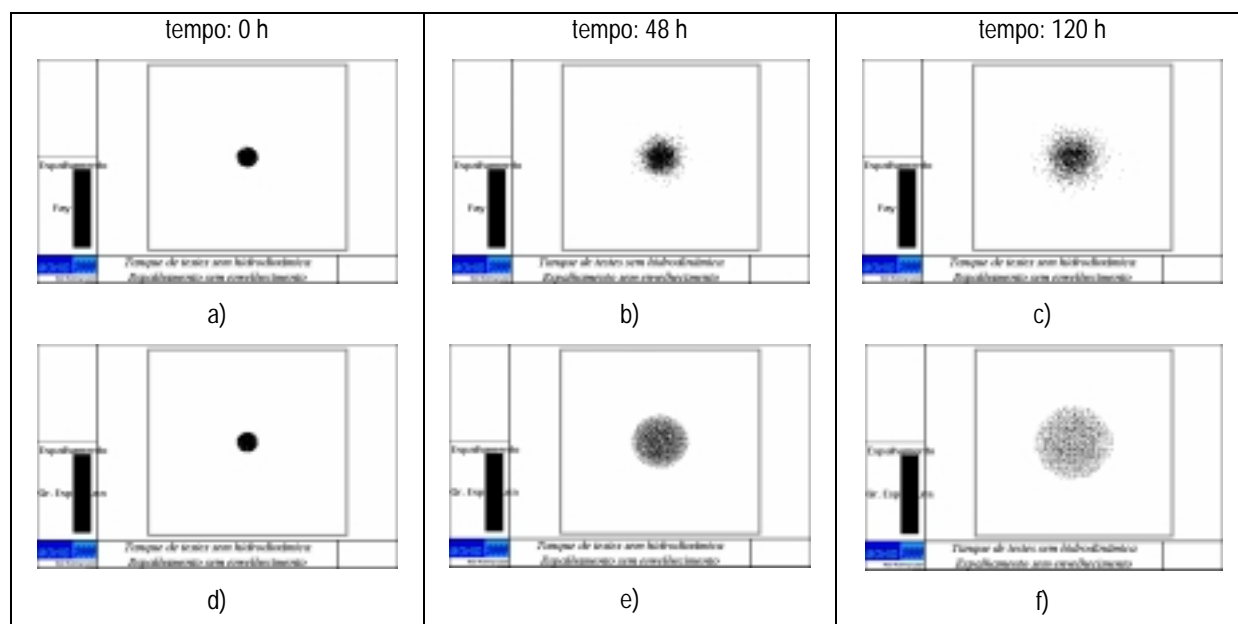


Figura 3 - Espalhamento com o método de Fay (difusão) e gradiente de espessura para o crude Statfjord

Na figura anterior, fica claro que ambos os métodos apontam para uma área bastante semelhante, apesar do algoritmo de Fay (isto é, velocidades aleatórias com coeficientes de difusão baseados no método de Fay) concentrar mais as partículas no centro da mancha. Contudo, os resultados da Figura 4 mostram que existe uma grande discrepância entre os valores da área obtidos para um espalhamento determinado por este algoritmo, e os valores teóricos determinados com base na formulação de Fay. O problema parece residir na formulação do cálculo da área – assume-se que a área ocupada é igual ao número de células com pelo menos uma partícula, vezes a área de cada célula. Uma vez que o algoritmo de Fay concentra mais partículas no centro, irão ser menos células ocupadas nas zonas mais exteriores da mancha, subestimando o valor da

área. Se o volume aumentar ou a malha de cálculo apresentar um passo espacial mais pequeno (na prática o efeito é o mesmo, uma vez que com ambas as alterações aumenta-se o número de células ocupadas pela mancha), a diferença entre a área teórica e a área calculada por difusão é ainda maior, devido à menor área ocupada pelas partículas afastadas do centro da mancha. Contudo, o processo de espalhamento não é afectado, uma vez que neste algoritmo, a maior ou menor deslocação das partículas não é dependente da malha de cálculo.

Com o algoritmo do gradiente de espessura, a distribuição das partículas é mais homogénea, ocupando maior número de células e aproximando-se mais da área teórica de Fay. Por essa razão, ao aumentar o volume ou reduzir o passo espacial da malha, os resultados obtidos para a área calculada pelo gradiente de espessura são mais próximos da área teórica – há mais células ocupadas, e conseqüentemente, uma maior área. Para além disso, o cálculo do espalhamento é mais realista, uma vez são calculadas mais velocidades nas faces das células. Este método de cálculo do espalhamento é, portanto, dependente da malha computacional.

Caso a malha de cálculo seja demasiado grosseira para o volume derramado, qualquer um dos algoritmos devolve valores muito elevados da área: imagine-se uma situação extrema de uma malha de tal modo grosseira, que a área ocupada pela mancha é menor que a área de uma célula: como a área calculada pelo modelo equivale à área das células ocupadas, resultaria uma área da calculada superior à área da mancha.

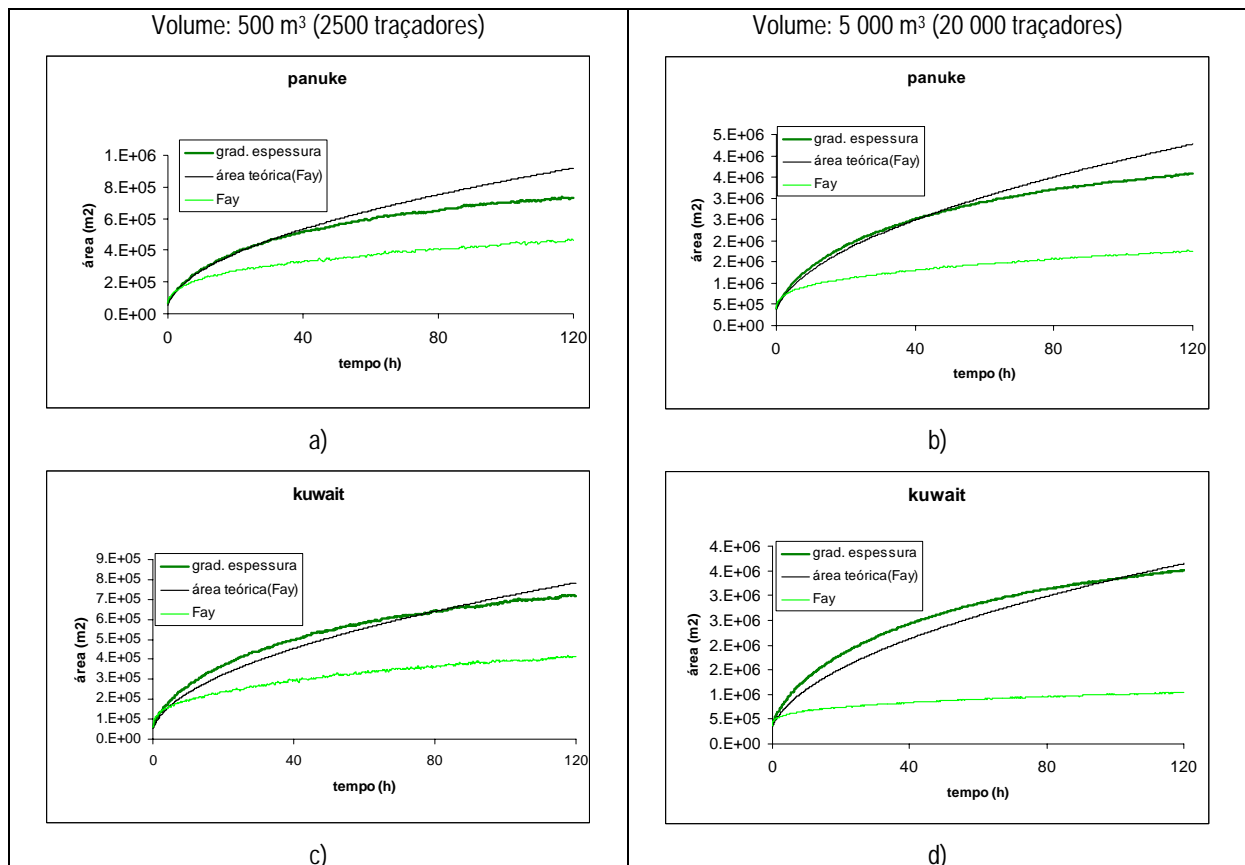


Figura 4 – Comparação dos diferentes métodos de cálculo do espalhamento a diferentes volumes, para os crudes Panuke e Kuwait

### 4.1.2 Com hidrodinâmica

Os testes com hidrodinâmica consistiram na verificação da resposta da mancha face a um escoamento superficial. Observou-se também o comportamento perante determinados obstáculos (ver Figura 5). Neste caso testou-se apenas um óleo (Kuwait), para um derrame de 5000 m<sup>3</sup>, com 20 000 traçadores, e uma malha de cálculo cujas células apresentam uma área de 100x100m. Os resultados obtidos foram bastantes satisfatórios.

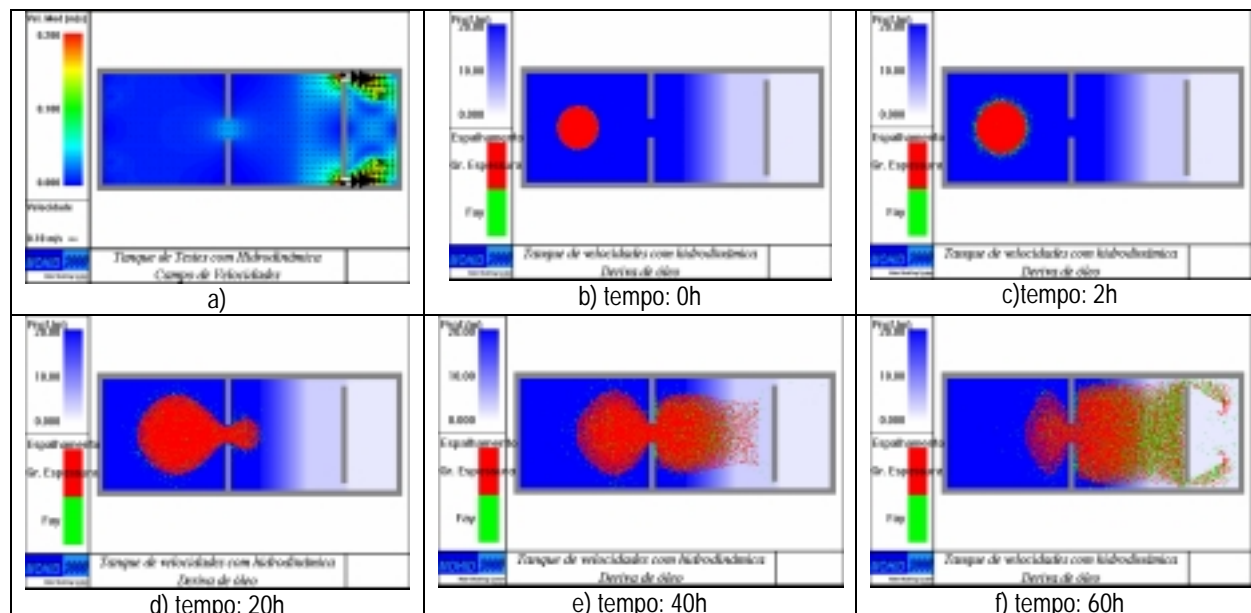


Figura 5 - Campo de velocidades (a) e evolução do espalhamento (b-e) de crude Kuwait num tanque com hidrodinâmica

## 4.2 ENVELHECIMENTO

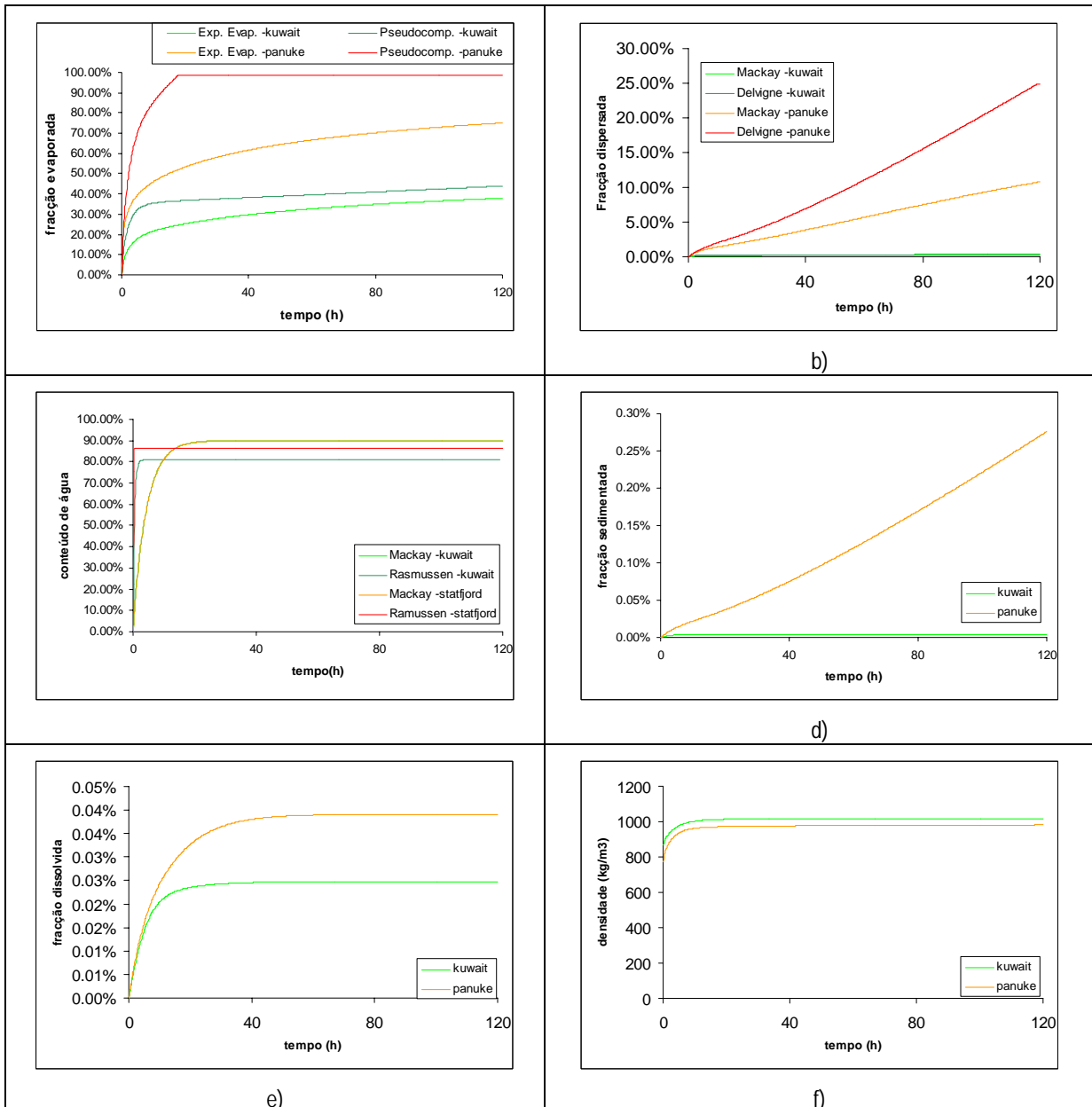
Os algoritmos desenvolvidos para as propriedades e processos de envelhecimento foram testados para vários tipos de óleos com propriedades distintas (descritos no anexo 8). Foi analisada a sensibilidade à variação de determinadas condições ambientais (como o vento e a temperatura da água), e realizada uma comparação com alguns resultados experimentais disponíveis. Estes testes foram desenvolvidos num tanque fechado e com profundidade uniforme, sem qualquer hidrodinâmica em que a malha de cálculo apresenta um passo espacial de 25m. Os resultados aqui apresentados referem-se unicamente ao derrame de 2 000 m<sup>3</sup>, embora tenham sido realizados testes para volumes variáveis, em que o modelo forneceu resultados semelhantes (no anexo 11 são também apresentados os resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 para os óleos derramados nas mesmas condições simuladas nas próximas secções 4.2.1 e 4.2.3, tendo demonstrado valores concordantes com o modelo desenvolvido).

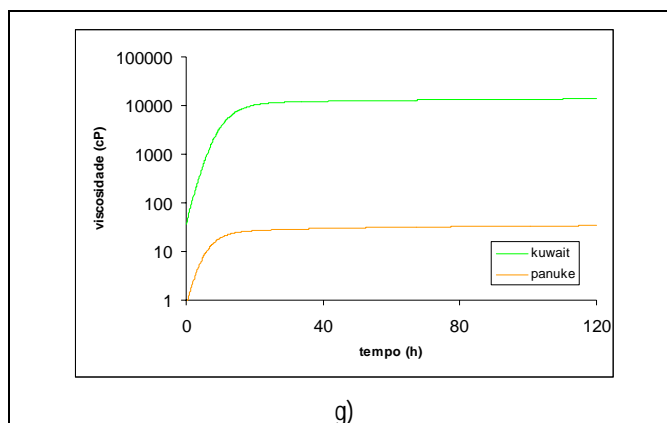
Refira-se que embora o modelo possua algoritmos alternativos para alguns processos, os resultados apresentados para um determinado processo foram calculados assumindo sempre a mesma escolha de algoritmos para os processos restantes. Assim, por defeito, o modelo utiliza as formulações de Mackay para a emulsificação e dispersão, e o método da exposição evaporativa para a evaporação. Estas escolhas foram feitas com base num maior conhecimento destes algoritmos, sendo mais frequentemente utilizados noutros modelos do género. Contudo, para o espalhamento, optou-se pela utilização do

algoritmo do gradiente de espessura, com base na qualidade dos resultados obtidos (como foi referido anteriormente, o método que se baseia no cálculo de velocidades aleatórias com coeficientes de difusão baseados no método de Fay, resulta numa área da mancha muito baixa).

Também ao nível de determinadas condições ambientais, para os resultados aqui apresentados, são utilizados valores por defeito. Assim, a velocidade do vento, temperatura da água e matéria particulada em suspensão são consideradas constantes e com os seguintes valores: vento – 5 m/s; temperatura da água – 18°C; m.p.s. – 100 mg/l.

### 4.2.1 Diferentes óleos





**Figura 6 – Evolução dos diferentes processos de envelhecimento para os crudes Kuwait e Panuke (Kuwait e Statfjord<sup>1</sup> para a emulsificação), para um derrame de 2 000 m<sup>3</sup>**

Como seria de esperar, o óleo mais pesado (Kuwait) apresenta menores perdas em todos os processos, devido à sua maior densidade – o que diminui as possibilidades de evaporação e dissolução –, e maior viscosidade –originando uma maior resistência à intrusão e mistura na coluna de água devido à rebentação das ondas, resultando numa menor dispersão e sedimentação e mais lenta formação de emulsões com a água. Contudo, a formulação de Mackay para a emulsificação não é sensível à diferença de viscosidades do óleo, apresentando o mesmo andamento para os dois óleos. Apesar disso, este método parece fornecer melhores resultados, uma vez que a formação de emulsões não deve ser tão rápida quanto demonstra a equação de Rasmussen. Refira-se também que para a dispersão, a formulação de Mackay fornece andamentos mais lentos que a formulação alternativa. A formulação de Delvigne é mais sensível à variação da viscosidade, pelo que com o aumento da mesma, a dispersão cessa a partir de um certo valor. É o que sucede para o crude Kuwait (embora isso não seja visível no gráfico b). Para o crude Panuke não se passa o mesmo, uma vez que o aumento de viscosidade não é tão drástico.

Quanto à evaporação, os resultados obtidos para o crude Panuke pelo método dos pseudo-componentes são bastante diferentes dos valores determinados pelo método da exposição evaporativa. Para os restantes óleos testados, os resultados são mais concordantes. Uma vez que o método dos pseudo-componentes exige o conhecimento da distribuição dos pontos de ebulição, esta informação para o crude Panuke provavelmente não será correcta. Este método mostra também uma maior evaporação nos instantes iniciais e menor nos momentos seguintes, relativamente ao outro método. A principal desvantagem deste método parece ser a necessidade de um conhecimento mais aprofundado acerca do óleo, nomeadamente os pontos de ebulição das diferentes fracções destiladas.

## 4.2.2 Variação das condições ambientais

O modelo foi testado para diferentes condições ambientais, com especial destaque para a velocidade do vento (e correspondente alteração na ondulação) e temperatura da água. Esses resultados são apresentados em anexo (anexo 10), correspondendo àquilo que seria de esperar. O aumento da evaporação com o vento está relacionado com o acréscimo no coeficiente de transferência de massa, enquanto que os restantes processos aumentam devido à maior mistura com a

<sup>1</sup> Não se utilizou o crude Panuke, como nos restantes processos, visto que para este óleo não são conhecidas as fracções de asfaltenos e parafinas, não permitindo a utilização da formulação de Rasmussen no processo de emulsificação

coluna de água, resultante de uma maior agitação marítima, relacionada com o maior vento. A mais rápida formação de emulsão com a água origina também um acréscimo mais acelerado na densidade e viscosidade.

O aumento de temperatura tem efeito mais acentuado na diminuição da viscosidade (repercutindo-se numa maior dispersão e numa emulsificação mais rápida), e numa maior facilidade de evaporação.

### 4.2.3 Comparação com dados experimentais

A dificuldade em encontrar valores experimentais referentes a derrames de óleo não permitiu uma comparação mais completa e correcta, pelo que apenas alguns processos e propriedades puderam ser comparados. As curvas experimentais apresentadas na Figura 7 são provenientes do trabalho experimental desenvolvido por Buchanan & Hurford (1988).

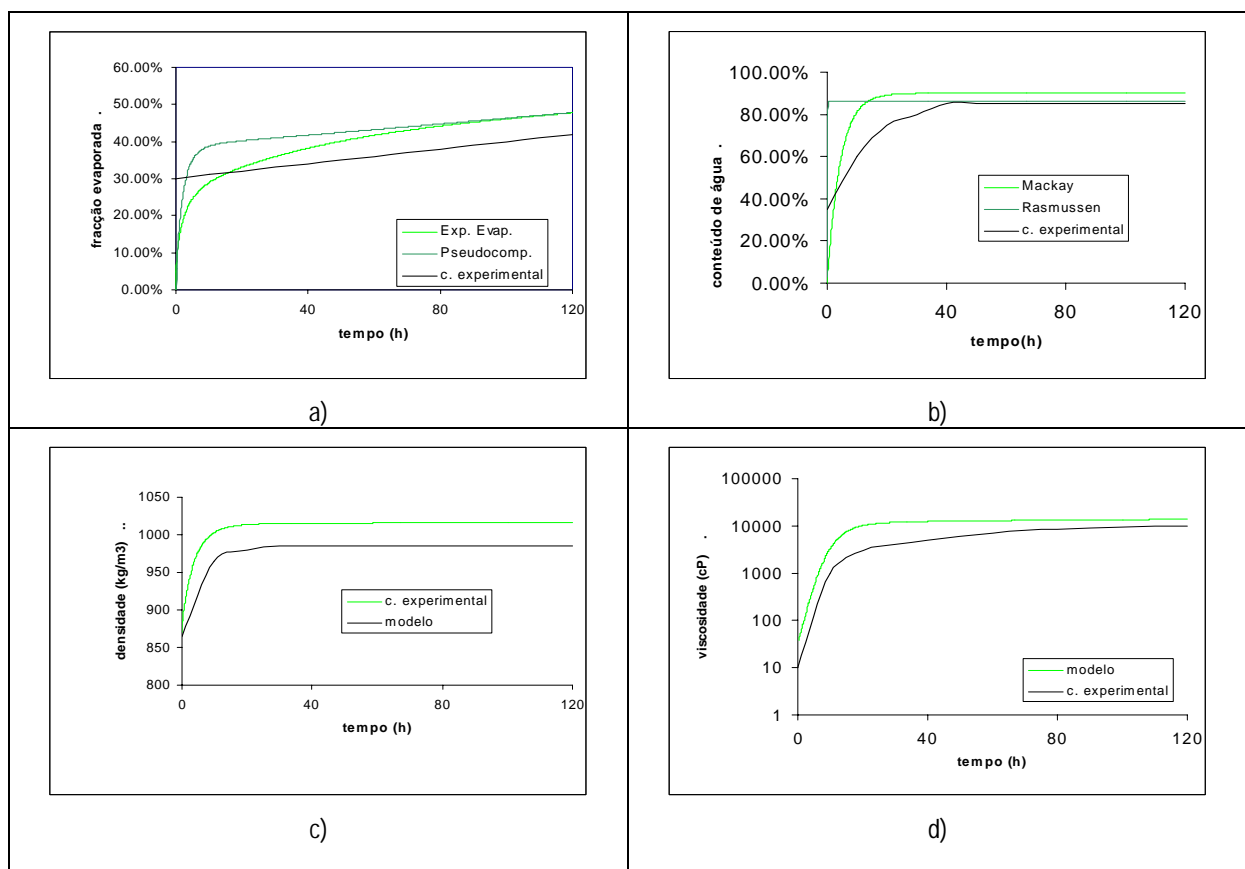


Figura 7 – Comparação de valores experimentais com resultados determinados pelo modelo, para o óleo Statfjord



## 5 Aplicação a um Caso Real

O modelo foi aplicado a um acidente ocorrido em Julho de 1989, no Porto de Sines, envolvendo o petroleiro Marão. A informação relativa a este acidente está disponível na Direcção Geral da Marinha Portuguesa e CILPAN (Sebastião, 2001).

### 5.1 DESCRIÇÃO DO ACIDENTE

Às 14h35m de 14 de Julho de 89, em condições de mar calmo mas de intenso nevoeiro, o navio-tanque Marão iniciava a manobra de acostagem ao cais petrolífero quando, devido à escassa visibilidade, embateu na cabeça do molhe Oeste (ver Figura 8), danificando dois tanques de carga.



Figura 8 -local do acidente do navio Marão no porto de Sines

Por volta das 16h30m deu-se a atracagem do navio no terminal. Estima-se que foram derramadas cerca de 4500 toneladas de crude Iranian Heavy. Embora tenham sido utilizadas barreiras flutuantes na área do terminal, estas revelaram-se ineficazes devido a deficiências mecânicas ou de colocação. Também foram utilizados dispersantes químicos em vários dias após o derrame, desconhecendo-se a sua eficácia. Contudo, devido à fraca agitação do mar estima-se que a sua acção tenha sido reduzida. Para além disso deu-se a formação de emulsões de água-no-óleo e o envelhecimento do crude, diminuindo ainda mais a acção dos dispersantes.

A 15 de Julho às 15:00 h verificava-se uma contaminação das praias de Sines até Porto Covo. Às 20:30m do mesmo dia a mancha encontrava-se a 3-4 milhas da costa, desde Sines até Vila Nova de Milfontes, apresentando-se a mancha progressivamente mais larga no sentido Norte-Sul. A 16 de Julho verificava-se uma mancha que derivava para Sul existindo ainda outras manchas dispersas. A 17 de Julho, uma mancha derivava para SSE, desde Vila Nova de Milfontes até à Zambujeira do Mar. A 18 de Julho observou-se a existência de duas manchas compactas, uma aproximando-se da costa (Almograve) e outra derivando para SW. No dia seguinte, durante a madrugada, registou-se a contaminação das praia de Almograve e zonas a Norte e Sul dessa praia.

### 5.2 SIMULAÇÃO DO ACIDENTE

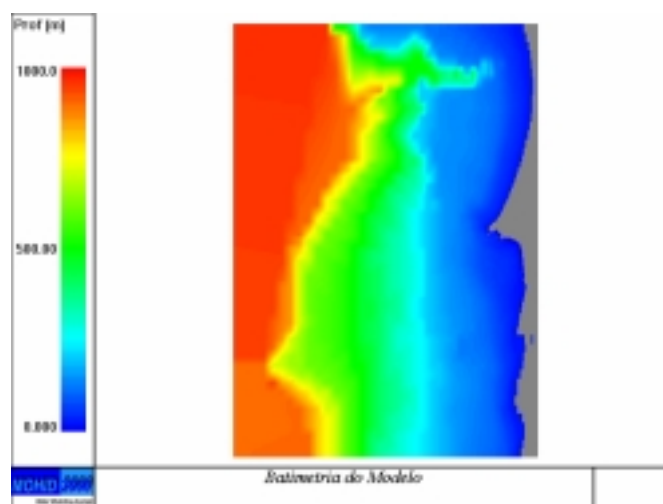


Figura 9 - batimetria utilizada para a simulação do derrame no Porto de Sines

A batimetria do modelo é mostrada na Figura 9. Corresponde a uma área total de 70 x 100 km<sup>2</sup>, com 237 pontos de cálculo na direcção meridional, apresentando um passo espacial que varia entre os cerca de 2km perto das fronteiras e os 100m próximo da costa. Na direcção zonal, a malha computacional tem 205 pontos de cálculo, com um passo espacial que varia entre os cerca de 2km e os 50 m, sendo a região do porto de Sines a que tem melhor resolução.

O modelo geral foi forçado impondo uma onda de maré na fronteira, determinado a partir do modelo global de maré FES95.2 (Le Provost et al., 1998) (ver cap. 5.6.2 dos anexos) para a região em estudo, e por acção da tensão de corte do vento. O vento foi introduzido no modelo através duma série temporal de valores medidos no local e na data do acidente (valores fornecidos pelo IM), com intervalos de 3 horas. O coeficiente de transferência da energia do vento para a superfície líquida foi de  $3 \times 10^{-3}$ .

Assumiu-se uma temperatura na água de 16.5°C (típica na época do ano modelada, para o local em questão – de acordo com os dados do IM), e considerou-se uma concentração constante de matéria suspensa, no valor de 5 mg/l.

Utilizaram-se condições de fronteira do tipo Blunberg and Kantha (este tipo de condições fronteira são um misto entre condições de fronteira do tipo radiativas e condições fronteira de nível imposto, de forma que se definem períodos de tempo em que se impõe o nível na fronteira e dentro destes intervalos de tempo a fronteira funciona como sendo radiativa). Para mais informações sobre estas condições de fronteira, consultar secção 5.6.1 dos anexos.

As condições iniciais são de nível constante e velocidade nula em todo o domínio; aplicou-se o modelo com apenas uma camada, e o passo temporal usado tanto para o cálculo da hidrodinâmica como para o movimento dos traçadores e processos do petróleo, foi de 10 segundos.

Considerou-se um coeficiente de transporte das partículas de óleo devido ao vento de 3%, e uma difusão turbulenta para um comprimento de mistura de 100m. Assumiu-se uma emissão instantânea para o volume de 4500 toneladas do crude Iranian Heavy (mais informações sobre o crude no anexo 8). Todos os processos de envelhecimento, bem como o espalhamento foram utilizados na simulação. Os métodos utilizados para calcular estes processos foram o método do gradiente de espessura para o espalhamento, exposição evaporativa para a evaporação, e os métodos de Mackay para a dispersão e emulsificação. Não se utilizaram os algoritmos referentes aos métodos de remoção, devido à escassa informação referente à aplicação dos mesmos.

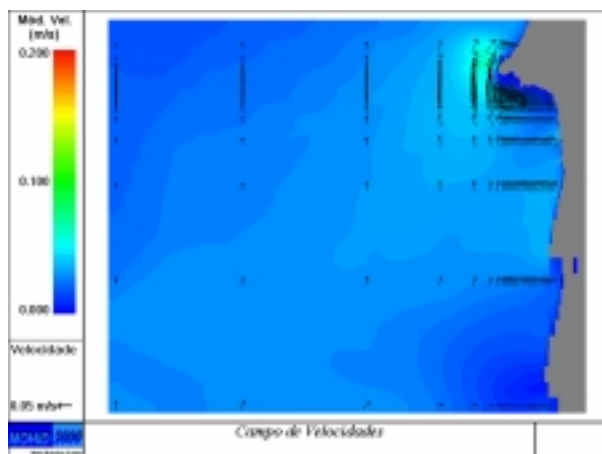
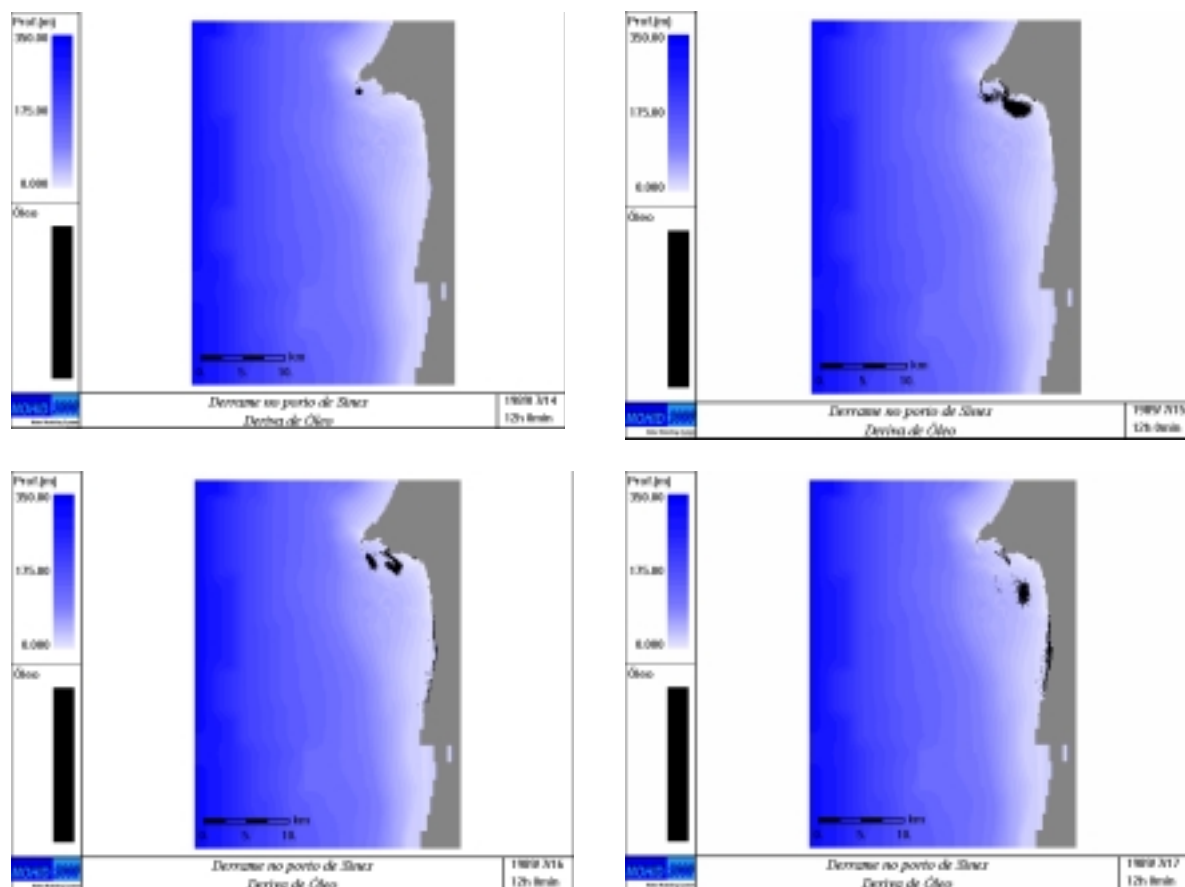


Figura 10 - Campo de velocidades no momento do derrame (14-7-89 - 12:00h)

Na Figura 10 são mostrados alguns vectores representativos do escoamento no momento do derrame. De seguida (na Figura 11) é mostrada a evolução da trajectória dos traçadores de petróleo derramado.



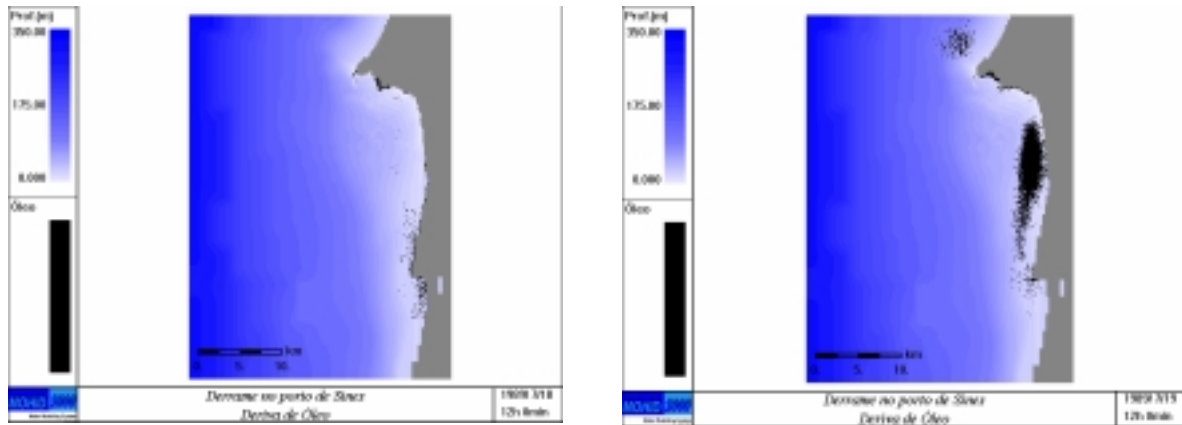
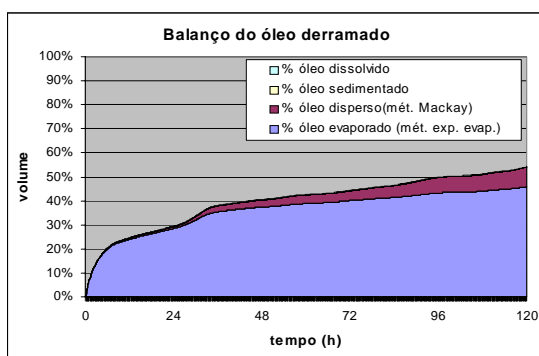


Figura 11 - localização do óleo após o derrame

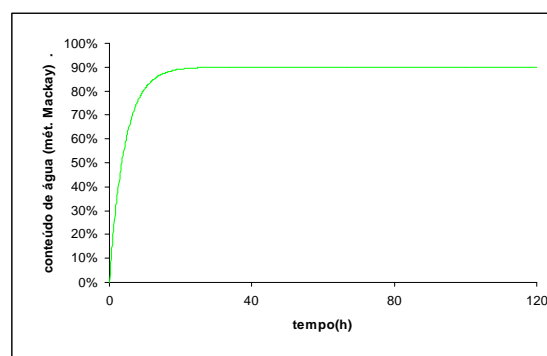
A simulação realizada para este acidente resulta numa concentração dos traçadores de petróleo junto à costa. Isto deve-se em grande parte ao efeito do vento, que é predominante no sentido de Noroeste. Refira-se que esta é uma das situações em que a utilização de um modelo de traçadores faz mais sentido, uma vez que o produto derramado ao interagir com a costa, demonstra na realidade um comportamento bastante diferente de uma mancha singular (seja ela circular ou elíptica), como muitas vezes é assumido na modelação de derrames.

Em 89 verificou-se a contaminação da costa desde Sines até à zona da Zambujeira do Mar, esta atingida no dia 18. Apesar do modelo confirmar o maior afastamento do local do derrame e contaminação da costa costeira com o produto para o mesmo dia, os traçadores não se deslocaram tão longe, ficando a cerca de 10 km do local afectado. Esta discrepância pode estar relacionada com o cálculo do escoamento, que foi realizado para apenas uma camada. A subdivisão na vertical em camadas com diferentes discretizações possibilitaria uma maior aproximação da realidade.

De seguida (Figura 12) mostra-se a evolução dos processos e propriedades específicas do óleo ao longo dos cinco dias simulados após este acidente



a)



b)

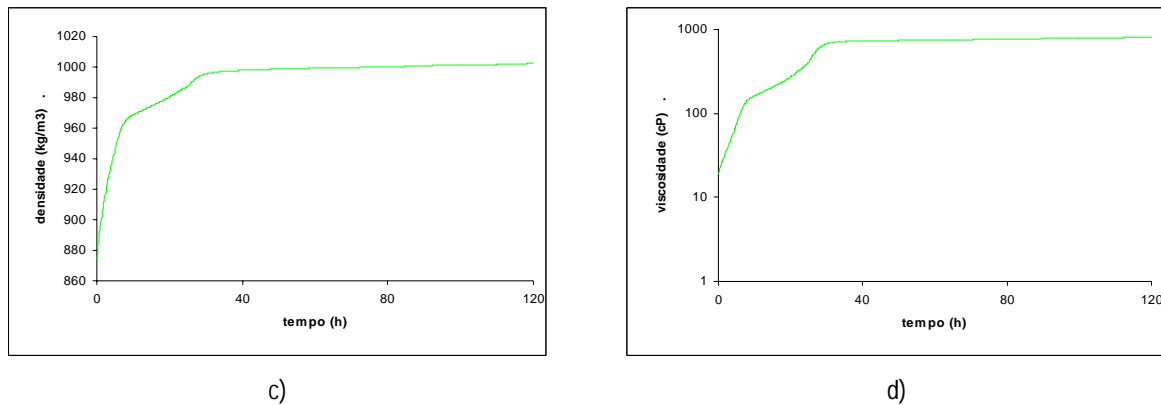


Figura 12 - evolução dos processos e propriedades do óleo derramado (Iranian Heavy)

Na Figura 12-a, fica evidenciada a predominância de perdas por evaporação e dispersão, e baixa fracção de óleo dissolvido e sedimentado. A dissolução é em geral um processo pouco significativo, enquanto que a adesão aos sedimentos e respectiva deposição no fundo prevista pelo modelo é muito baixa, porque para a matéria em suspensão foi utilizado um valor de típico dos oceanos e constante no espaço, o que não corresponde à realidade, uma vez que junto à costa a matéria particulada é muito mais elevada.

A deflexão nos processos de evaporação e dispersão (com repercussões no andamento da densidade e viscosidade) 12 horas após o derrame, resulta da redução da área ocupada pelo óleo derramado, devido à sua aproximação à costa.

Destaque-se também o facto do modelo não estar neste momento a considerar a deposição de óleo na costa – o mais correcto seria considerar que uma parte do óleo que chega à costa fica depositado na mesma, numa fracção variável, consoante o tipo de material existente na costa.

## 6 Conclusões e Sugestões para o Futuro

### 6.1 PRINCIPAIS LIMITAÇÕES DO MODELO DESENVOLVIDO E RESULTADOS OBTIDOS

São várias as razões que levam a que a simulação de derrames de óleo seja um dos maiores e mais difíceis desafios na área de modelação nos dias de hoje.

Na realidade, ainda não há um sistema de equações que permita a modelação de todos os processos envolvidos no óleo derramado. Os produtos petrolíferos apresentam centenas de composições diferentes, com componentes distintos, originando diferentes comportamentos na água e dificultando a previsão desses mesmos comportamentos.

Por outro lado, tanto a trajectória do óleo, como o seu envelhecimento são determinados por diversas condições meteorológicas e oceanográficas, e por um conjunto de processos físico-químicos estreitamente interligados, que afectam as propriedades do óleo, à medida que este se move na superfície líquida. Muitas vezes, a informação relacionada com estas condições e propriedades é de difícil obtenção. Para além disso, a falta de dados de campo e valores experimentais dificulta ainda mais a tarefa desenvolvida.

Com o modelo desenvolvido, a trajectória do óleo derramado é calculada com base num modelo de traçadores, assumindo que o óleo pode ser considerado um largo conjunto de partículas que se desloca por advecção, difusão turbulenta e espalhamento específico do óleo. Em zonas onde os campos de correntes variam muito (por exemplo em estuários e zonas costeiras), esta é mesmo a única forma de simular o transporte do óleo sem erros grosseiros.

Apenas é simulada a trajectória horizontal das partículas, desprezando-se o movimento vertical.

Também a interacção das manchas com a costa não é contabilizada neste modelo, apesar de muitas vezes a deposição costeira representar importantes reduções da massa de óleo inicialmente à superfície.

Para o espalhamento, realizaram-se duas abordagens diferentes: uma com base no cálculo de velocidades aleatórias com coeficientes de difusão resultantes do método de Fay, e outra abordagem inovadora, que assume como força motriz o gradiente de espessura, (calibrado com base em determinados parâmetros físico-químicos do óleo e da água) calculado na faces das células e depois interpolado para a posição das partículas nas células. Assim, este método tem a desvantagem de ser fortemente dependente da malha de cálculo. Embora ambos os métodos forneçam espalhamentos relativamente semelhantes, o método de Fay utilizado concentra mais as partículas no centro da mancha.

Contudo, na prática após poucos dias ou mesmo horas, e/ou na presença de forte turbulência oceânica, o espalhamento natural do petróleo (dependente das suas características físico-químicas) deixa de ser importante, passando a dispersão mecânica a ser comandada por efeitos de turbulência.

A área total das partículas é determinada com base no conjunto de células ocupadas com pelo menos uma partícula. Resulta assim que este cálculo também depende fortemente da malha de cálculo, fornecendo resultados muito baixos para o espalhamento de Fay, devido à maior concentração de partículas no centro da mancha.

Exceptuando o espalhamento, a evolução das propriedades e restantes processos do petróleo é feita para o conjunto das partículas, ou seja, são realizados os cálculos para a mancha de petróleo no seu conjunto, assumindo um comportamento homogéneo do petróleo, e não para cada uma das partículas individualmente. As condições ambientais e propriedades da água também são consideradas constantes em qualquer parte da mancha, num determinado instante. O valor assumido para essas mesmas condições ambientais é aquele que é registado na origem do acidente.

A consideração dos processos do petróleo para a mancha encarada como uma entidade única pode ter alguns inconvenientes. Por um lado, dificulta a modelação de derrames em contínuo. Imagine-se o caso de um derrame contínuo durante 5 dias: é óbvio que as propriedades do óleo fresco que está a ser derramado após esse período de tempo, nada tem a ver com o óleo já envelhecido, que permanece cinco dias à superfície. Por outro lado, o modelo deixa de ser sensível a condições ambientais variáveis em diferentes localizações do óleo. Por exemplo, pode acontecer que parte do óleo fique num local do acidente, e que o restante sofra uma forte deslocação para uma zona em que determinadas condições ambientais sejam diferentes daquelas condições registadas na origem.

Assume-se que a temperatura da mancha de óleo após o derrame rapidamente iguala a temperatura da água, desprezando efeitos da radiação solar ou qualquer outro processo de transferência de energia. Muitas vezes a mancha demora algum tempo até igualar a temperatura da água (NOAA, 2000), podendo acontecer que a temperatura do óleo seja consideravelmente mais elevada que a da água (Rasmussen, 1985). Contudo, a influência da temperatura nos processos simulados não pareceu ser suficientemente relevante para justificar a criação de um algoritmo responsável pela variação da temperatura, contabilizando transferências de energia com o ar e água.

A aplicação do modelo para períodos demasiado longos (maiores que uma semana) aumenta bastante o nível de incerteza, uma vez que a partir de determinado momento há que ter em conta outros processos como a biodegradação e fotooxidação, que não são simulados neste modelo.

A equação analítica de Mackay (exposição evaporativa) utilizada para a evaporação apresenta limitações para óleos com curvas de destilação não-lineares, como é geralmente frequente nos produtos refinados. Para estes produtos, convém haver um conhecimento da distribuição dos pontos de ebulição, de modo a que seja aplicado o método dos pseudo-componentes para obter resultados mais fiáveis.

A informação relativamente ao início do processo de emulsificação é ainda uma incógnita para muitos produtos petrolíferos, pelo que dada a importância deste processo (que pode aumentar drasticamente a viscosidade da mancha), os resultados podem muitas vezes ser bastante díspares da realidade, caso não haja uma informação correcta sobre a cinética do processo.

Em geral, os processos simulados parecem responder bem às alterações provocadas pela utilização de diferentes produtos derramados, bem como a diferentes condições ambientais. A comparação com os escassos dados experimentais também parece ser satisfatória.

A aplicação do modelo à simulação do acidente ocorrido com o petroleiro *Marão* no porto de Sines em 89, mostrou nos resultados a fragmentação da mancha de óleo, bem como a contaminação de uma larga faixa costeira, tal como se verificou na realidade. Contudo, no que respeita à advecção, a trajectória das partículas ficou aquém do registado, em cerca de 10 km, ao fim de 5 cinco dias. Este facto parece não estar directamente relacionado com o módulo de petróleo, mas sim no

cálculo das velocidades de escoamento, que foram realizadas para apenas uma camada, subestimando o escoamento superficial.

Apesar de terem sido desenvolvidos algoritmos bastante simplificados para simularem a aplicação de dispersantes químicos e recuperadores mecânicos, estes algoritmos não foram utilizados, porque não foram obtidos dados relativos a um acidente com informação concreta sobre os meios de combate utilizados.

## 6.2 DESENVOLVIMENTOS FUTUROS

Uma importante acção a empreender no futuro será uma melhor calibração do modelo com dados experimentais ou reais, caso esses dados existam.

Também seria útil a introdução de algoritmos respeitantes à biodegradação e foto-oxidação, uma vez que estes se tornam relevantes a longo prazo.

O modelo está pronto para, com relativa facilidade, considerar o movimento vertical das partículas ou seja, a aplicação do modelo a três dimensões. Existe alguma bibliografia relativa a este processo, pelo que a concretização desta tarefa não parece ser muito complicada. A importância da utilização de um modelo tridimensional reside na melhoria que o mesmo introduz na previsão de determinados impactes em zonas aparentemente insuspeitáveis com um modelo bidimensional, e no melhor conhecimento que se tem da contaminação do meio marinho.

Também se recomenda uma melhor preparação do modelo para a previsão de derrames em contínuo. Uma solução para contornar esta situação pode passar pela consideração de sucessivas emissões instantâneas, tratando cada uma dessas emissões instantâneas de modo independente. Embora esta solução já seja possível de aplicar, o modelo não está suficientemente desenvolvido para reproduzir de forma simplificada e automatizada os resultados pretendidos.

Uma vez que o cálculo da área ocupada pelas partículas de óleo é bastante dependente da resolução da malha de cálculo, uma abordagem diferente para esse cálculo poderia melhorar significativamente alguns resultados de processos de envelhecimento que estão directamente relacionados com a área. Uma melhoria simples poderia passar pela contabilização exclusiva da área das células de cálculo que fossem ocupadas por mais que um determinado número de partículas, desprezando as restantes células com um número muito baixo de partículas, face à dimensão da célula. Outra solução mais complexa consistiria na subdivisão da malha de cálculo ocupada por partículas de óleo, o que poderia melhorar significativamente os resultados, mas aumentar significativamente o tempo de execução do modelo.

Por último, destaque-se a necessidade de aprofundar os conhecimentos relativamente à interacção do óleo com a costa, no sentido de modelar a quantidade de óleo removido da superfície, após contacto com determinados tipos de costa.



---

## Bibliografia

Buchanan I., N. Hurford (1988). Methods for predicting the physical changes in oil spill at sea. *Oil & Chemical Pollution*, 4(4), pp. 311-328

CILPAN information, *Acordo de Lisboa*, nº 33, Maio de 2001, Lisboa

Clark R. B. (1997), *Marine Pollution*, Fourth Edition, Clarendon Press, Oxford

Costa, Marylena (1999). *Evolução de hidrocarbonetos derramados nas zonas costeiras e estuarinas*. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, Coimbra

Delvigne G.A.L., C.E. Sweeney (1998). *Natural Dispersion of Oil*. *Oil & Chemical Pollution*. 4, pp. 281-310

Expresso, *Costa portuguesa sofreu 700 derrames*, 25 de Julho de 1998 ([www.expresso.pt](http://www.expresso.pt))

Fay J.A. (1969). *The spread of oil slicks on a calm sea*. *Oil on the Sea*, Plenum Press, NY, pp. 53-63

Fingas M.F., D.A. Kyle, E. Tennyson (1993). *Physical and Chemical Studies on Dispersants: The effect of Dispersant Amount and Energy*. Proceedings of the Sixteenth Arctic and Marine Oil Spill Program Technical Seminar, Environment Canada, Ottawa, Ontario, pp. 861-876

Fingas, M., Jokuty P., Fieldhouse, B., 1996, *Oil Spill Behaviour and Modeling*. Environmental Technology Center, Environment Canada, Ottawa, Canada

Flores H., A. Andreatta, G. Llona, and I. Saavedra (1998). *Measurements of oil spill spreading in a wave tank using digital image processing*. *Oil and hydrocarbon spills, modeling, analysis and control*, WIT Press, Southampton, UK, pp.165-173

Garcia-Martinez, Reinaldo, Henry Flores-Tovar (1999). Computer Modeling of Oil Spill Trajectories with a High Accuracy Method. *Spill Science & Technology Bulletin*, Vol. 5, No.5/6, pp. 323-330

Huang, J.C., F.C. Monastero (1982). *Review of the state-of-the-art of oil spill simulation models*. Final Report submitted to the American Petroleum Institute

Kung, Chen-Shan, Huo-Hsu Su, Yi-Ching Chen, Yao-Li Teng. Simulation of Oil Spills in a Harbor

Le Provost, C., F. Lyard, J.M. Molines, M.L. Genco and F. Rabilloud (1998). A Hydrodynamic Ocean Tide Model Improved by assimilating a satellite altimeter derived dataset. *J. Geophys. Res.* Vol. 103 N. C3.

Leitão, Paulo (1996). *Modelo de dispersão lagrangeano tridimensional* – dissertação de mestrado, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa

- Mackay D., I. A. Buist, R. Mascarenhas, S. Paterson (1980). *Oil spill processes and models*. Environment Canada Manuscript Report No. EE-8, Ottawa, Ontario
- Mackay D., R.S. Matsugu (1973). *Evaporation rates of liquid hydrocarbon spills on land and water*. Canadian Journal Chemical Engineering, pp. 434-439
- Mooney, M.(1951). *The viscosity of a concentrated suspension of spherical particles*, J Colloidal Science, 10, 1951, pp. 162-170
- NOAA (1994). *ADIOS™ (Automated Data Inquiry for Oil Spills) user's manual*. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut, 50 pp.
- NOAA (2000). *ADIOS™ (Automated Data Inquiry for Oil Spills) version 2.0*. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut
- Payne J.R., B.E. Kirstein, G.D. McNabb, J.L. Lambach, R. Redding, R.E. Jordan, W. Hom, C. De Oliveira, G.S. Smith, D.M. Baxter, R. Gaedel (1984). *Multivariate analysis of petroleum weathering in the marine environment – Sub arctic*. Environment Assessment of the Alaska Continental Shelf. Final reports of the principal investigations, Vol. 22, US Dept. Commerce, NOAA/NOS/OAD. US Dept. Interior, MMS, Vol. II
- Payne,J.R., B.E. Kirstein, J.R. Clayton, C. Clary. R. Redding, D. McNabb, G. Farmer. (1987). *Integration of Suspended Particulate Matter and Oil Transportation Study*. Final Report, Report to Minerals Management Service, MMS 87-0083.
- Proctor, R. ,R.A. Flather, A.J. Elliot (1994). *Modelling tides and surface drift in the Arabian Gulf – application to the Gulf oil spill*. Continental Shelf Res 14:531-545
- Rasmussen, D. (1985). *Oil Spill Modelling – A tool for cleanup operations*. Proc. 1985 Oil Spill Conference, American Petroleum Institute, 243-249
- Reed M., *The physical fates component of the natural resource damage assessment model system*(1989).Oil & Chemical Pollution, 5, pp. 99-123
- Sebastião, Paulo (2001). *Modelação de incertezas na previsão da evolução de derrames de produtos petrolíferos no mar – dissertação de mestrado*, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa.
- Silva, Marina. *Enquadramento a nível mundial e políticas de utilização mais significativas*, Seminário sobre a aplicação de dispersantes no combate à poluição marítima por hidrocarbonetos e os seus impactes no ambiente, INAG, 28 Junho de 2001, Lisboa
- Silva, Sérgio. *Modelação Numérica de Derrames de Hidrocarbonetos no Mar: Aproximação Lagrangeana do Transporte*. Dissertação de Mestrado, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, 1997, Lisboa

Stiver W., D. Mackay (1984). *Evaporation rate of spills of hydrocarbons and petroleum mixtures*. Environmental Science and Technology, 18(11), pp. 834-840

Stolzenbach K.D., O.S. Madsen, E.E. Adams, A.M. Pollack and C.K. Cooper (1977), *A review and evaluation of basic techniques for predicting the behavior of surface oil slicks*. MIT Sea Grant Program, Report No. 222, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts

Varlamov, Sergey M., Kazuko Abe (2000). Oil Spill Initial Stage Spreading and Physical Properties Model. Reports of Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University, No. 119 pp. 89-101

Yang W. C., H. Wang (1977). *Modelling of oil evaporation in aqueous environment*. Water Research, 11, pp. 879-887

**Endereços pesquisados na Internet:**

<http://europa.eu.int/eur-lex/pt/index.html> (Eur-Lex –Portal para o Direito da União Europeia)

[http://europa.eu.int/scadplus/scad\\_pt.htm](http://europa.eu.int/scadplus/scad_pt.htm) (SCADPlus)

<http://response.restoration.noaa.gov> (Office of Response and Restoration, National Ocean Service, National Oceanic and Atmospheric Administration)

[http://seawifs.gsfc.nasa.gov/OCEAN\\_PLANET/HTML/peril\\_oil\\_pollution.html](http://seawifs.gsfc.nasa.gov/OCEAN_PLANET/HTML/peril_oil_pollution.html) (NASA)

[www.diramb.gov.pt](http://www.diramb.gov.pt) (Sistema de Informação Documental sobre Direito do Ambiente – SIDDAMB)

[www.epa.gov/superfund/programs/er](http://www.epa.gov/superfund/programs/er) (Office of Emergency and Remedial Response, United States Environmental Protection Agency)

[www.globelaw.com](http://www.globelaw.com) (Globelaw International Environmental Law and Multilateral Conventions )

[www.greenpeace.org](http://www.greenpeace.org) (Greenpeace)

[www.itopf.com](http://www.itopf.com) (The International Tanker Owners Pollution Federation 2000)

[www.naturlink.pt](http://www.naturlink.pt) (Naturlink)

**INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO**

**LICENCIATURA EM ENGENHARIA DO AMBIENTE**

**MODELAÇÃO DE DERRAMES DE HIDROCARBONETOS**

**TRABALHO FINAL DE CURSO**

**- ANEXOS -**

AUTOR: RODRIGO FERNANDES Nº 43402

ORIENTADOR: PROF. RAMIRO NEVES

CO-ORIENTADOR: ENG. JOSÉ CHAMBEL LEITÃO

31-10-2001

# Índice

1	Derrames de Hidrocarbonetos: Orientação adoptada por Portugal.....	1
1.1	Enquadramento legal e objectivos a nível nacional.....	1
1.2	Convenções Internacionais ratificadas por Portugal.....	3
1.3	Política Europeia.....	6
2	Características e propriedades dos hidrocarbonetos.....	9
2.1	Composição química.....	9
2.2	Propriedades físico-químicas.....	10
3	Principais Métodos de Resposta a um Derrame de Petróleo.....	14
3.1	Dispersantes Químicos.....	14
3.2	Recuperação Mecânica.....	14
3.3	Queima In-Situ.....	15
3.4	Biorremediação.....	15
4	Descrição Geral do Sistema MOHID.....	16
5	Módulo Hidrodinâmico.....	18
5.1	Equações resolvidas.....	18
5.2	Principais aproximações.....	20
5.3	Fecho turbulento.....	22
5.4	Discretização Espacial.....	25
5.4.1	Discretização Vertical.....	25
5.4.2	Discretização Horizontal.....	29
5.5	Discretização Temporal.....	31
5.6	Condições de Fronteira.....	32
5.6.1	Fronteiras abertas.....	32
5.6.2	Fronteiras fechadas.....	36
6	Módulo de Transporte Lagrangeano.....	38
6.1	Deslocamento dos traçadores.....	38
6.1.1	Termo difusivo.....	39
6.1.2	Deslocamento aleatório.....	39
6.2	Emissão dos traçadores.....	41
6.3	Condições de Fronteira.....	42
7	Interface Gráfica do modelo Mohid.....	43
7.1	Organização de um projeto.....	43
7.2	Entrada de dados.....	44
7.3	Saída de resultados.....	47
7.4	Visualização dos resultados.....	48
8	Manual Técnico do Módulo de Petróleo.....	50
8.1	Estrutura interna.....	50
8.1.1	Construtor.....	50
8.1.2	Selector.....	50
8.1.3	Modificador.....	50
8.1.4	Destrutor.....	51
8.2	Métodos de apoio ao modelo de petróleo.....	51
8.2.1	Inicialização do Módulo de Petróleo.....	51
8.2.2	Cálculo da área e volume totais do derrame.....	52
8.2.3	Espessura média de petróleo em cada célula.....	52
8.2.4	Troca de informação com o método responsável pelo envelhecimento do petróleo.....	52

8.3	Ligação ao mohid2000 .....	52
8.4	Output .....	53
8.5	Entrada de dados .....	54
8.6	Palavras-Chave .....	54
9	Propriedades dos Produtos Petrolíferos Utilizados no Modelo .....	57
10	Variação das Condições Ambientais .....	58
10.1	Efeito do vento .....	58
10.2	Efeito da temperatura .....	59
11	Resultados obtidos pelo modelo ADIOS2 .....	61
11.1	Kuwait .....	61
11.2	Panuke .....	61
11.3	Statfjord .....	62
12	Referências .....	63

## **Índice de Tabelas**

<i>Tabela 1 - Classificação dos óleos com base na gravidade API.....</i>	<i>11</i>
<i>Tabela 2 - Palavras-chave no ficheiro de dados do módulo lagrangeano, necessárias para a simulação de derrames de óleo .....</i>	<i>56</i>
<i>Tabela 3 - Principais propriedades dos óleos testados no modelo .....</i>	<i>57</i>

## Índice de Figuras

<i>Figura 1- Propagação de uma onda de superfície livre simulada pelo sistema Mohid. Neste caso esquemático a onda é imposta num pequeno canal situado no lado direito do domínio e radiada pelas outras três fronteiras.....</i>	<i>21</i>
<i>Figura 2- Propagação de uma onda interna simulada pelo sistema Mohid. Simulação da propagação de ondas internas ao longo de um canal com 50 km e 1000 m de profundidade com uma estratificação inicial linear de temperatura (24°C à superfície e 4 °C no fundo). A figura mostra a variação da isolinha dos 20 °C ao longo de todo o canal e entre os 150 e 250 m de profundidade. O canal tem fronteira aberta (radiação) do lado direito e fechada do lado esquerdo, as ondas internas são formadas extraindo, nas três primeiras células a contar do lado esquerdo, calor da superfície a uma taxa de 300 W/m<sup>2</sup>.....</i>	<i>21</i>
<i>Figura 3 – Malha ilustrativa das potencialidades de discretização vertical do sistema Mohid. ....</i>	<i>26</i>
<i>Figura 4 – Cortes verticais mostrando escoamentos secundários num talude. A figura a) apresenta resultados obtidos com uma malha Lagrangeana que foi inicializada com uma configuração de malha sigma enquanto a figura b) representa o mesmo escoamento com uma malha cartesiana com células cortadas junto ao fundo. ....</i>	<i>27</i>
<i>Figura 5 – Campo de correntes no Atlântico. Resultados produzidas no âmbito do projecto científico europeu OMEX (Coelho et al., in press).....</i>	<i>28</i>
<i>Figura 6 – Campo de salinidades no estuário do Douro para uma situação de caudal médio e baixa mar.....</i>	<i>28</i>
<i>Figura 7 – Escoamento na futura Albufeira do Alqueva. Quando a barragem desta albufeira estiver construída o Alqueva será o maior lago artificial da Europa.....</i>	<i>29</i>
<i>Figura 8 – Simulação da dispersão da pluma térmica duma central termoelétrica situada perto de Lisboa. a) Campo de velocidades à superfície b) campo vertical de temperatura.....</i>	<i>29</i>
<i>Figura 9- Exemplo de aplicação de passo variável ao estuário do Tejo (Portugal).....</i>	<i>30</i>
<i>Figura 10 – Classificação de malhas 2D descentradas segundo Arakawa e Lamb (1977).....</i>	<i>30</i>
<i>Figura 11 – Discretização temporal do método de 6 equações proposto por Leendertse, 1967. ....</i>	<i>32</i>
<i>Figura 12 – Discretização temporal do método S21proposto por Abbott et al., 1973. ....</i>	<i>32</i>
<i>Figura 13 – Modelos encaixados aplicados ao estuário do Tejo. Estudo efectuado no âmbito do plano de monitorização da qualidade da água das praias da costa do Estoril.....</i>	<i>34</i>
<i>Figura 14– Condições para um ponto de cálculo de velocidades se considerar descoberto.....</i>	<i>37</i>
<i>Figura 15- Cálculo da velocidade média dos traçadores.....</i>	<i>39</i>
<i>Figura 16- Movimento aleatório forçado por vórtices maiores que o traçador (círculo cinzento). ....</i>	<i>40</i>



<i>Figura 17 – Definição dos limites de um derrame, emissão por caixas.....</i>	<i>42</i>
<i>Figura 18: Organização hierárquica das corridas no modelo Mohid .....</i>	<i>44</i>
<i>Figura 19: Arquivo de dados do modelo Mohid.....</i>	<i>45</i>
<i>Figura 20: Construção de um arquivo de dados a partir da GUI.....</i>	<i>46</i>
<i>Figura 21: Fornecimento de séries temporais .....</i>	<i>47</i>
<i>Figura 22: Opções do Browser do arquivos transientes.....</i>	<i>48</i>
<i>Figura 23 – Relação entre o módulo das partículas do modelo MOHID2000 e a classe Petróleo.....</i>	<i>53</i>
<i>Figura 24 - Evolução dos processos de envelhecimento do crude Kuwait a diferentes velocidades do vento.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 25 - Evolução dos processos de envelhecimento do crude Kuwait a diferentes temperaturas da água.....</i>	<i>60</i>
<i>Figura 26 - Resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 para o óleo Kuwait .....</i>	<i>61</i>
<i>Figura 27 - Resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 para o óleo Panuke.....</i>	<i>61</i>
<i>Figura 28 - Resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 para o óleo Statfjord.....</i>	<i>62</i>

# 1 Derrames de Hidrocarbonetos: Orientação adoptada por Portugal

## 1.1 ENQUADRAMENTO LEGAL E OBJECTIVOS A NÍVEL NACIONAL

À medida que a sociedade foi reconhecendo que os derrames de óleos causavam graves danos para as costas e praias, provocando a morte de aves e de outros animais marinhos, atingindo consideravelmente importantes sectores da actividade económica, foi desenvolvida legislação no sentido de minimizar a intensidade deste tipo de poluição. Saliente-se para esse efeito os decretos n.º 14 354, de 29 de Setembro de 1927, no que respeita ao continente, e n.º 14 853, de 5 de Janeiro de 1928 para as províncias ultramarinas. Mais tarde, em 1965 o Decreto-Lei n.º 46 619 alargava os espaços marítimos em que não era permitido o lançamento de óleos.

Só em 1971, através do Decreto-Lei n.º 90/71 de 22 de Abril - Poluição das águas, praias e margens., foi regulamentada a supressão total das descargas em mar português dos óleos persistentes, bem como de toda e qualquer substância passível de poluir as águas. As multas impostas aos infractores poderiam ir até aos mil contos.

No ano de 1987, a criação da Lei de Bases do Ambiente enunciou que os novos conceitos de protecção e preservação do meio marinho e de combate à poluição naquele meio devem radicar numa proibição genérica de toda a actividade humana que nele introduza qualquer substância, organismo ou energia, desde que provoque efeitos susceptíveis de fazer perigar a saúde humana, os ecossistemas e os recursos vivos, bem como prejudicar as demais legítimas utilizações do mar.

Em 1993 o governo português estabeleceu a criação do PML - Plano Mar Limpo, que tem um carácter marcadamente operacional. Este "Plano de Emergência para o Combate à Poluição das Águas Marinhas, Portos, Estuários e Trechos Navegáveis dos Rios, por Hidrocarbonetos e outras Substâncias Perigosas" foi aprovado por Resolução do Conselho de Ministros n.º 25/93, de 15 de Abril (ver anexo 1).

O PML estabelece um dispositivo de resposta a situações de derrames de hidrocarbonetos ou outras substâncias perigosas ao definir responsabilidades das entidades e competências das autoridades encarregues da execução das várias tarefas necessárias.

Assim, este plano propõe fundamentalmente:

- actuação atempada, eficaz e concertada no combate a estas situações;
- estabelecimento de planos de intervenção;
- efectivação de medidas de carácter logístico (aquisição, conservação e manutenção de materiais e equipamentos, preparação prévia de instalações e infra-estruturas) e organizacional (plano de comunicações: acções, estudos de antecipação de situações de poluição e projecção dos resultados de combate; obtenção de informação );
- formação técnica dos responsáveis pelo combate à poluição, bem como do pessoal de intervenção;
- realização de exercícios periódicos;

- criação de Centros de Operações e Bases Logísticas

O PML é da responsabilidade do Sistema da Autoridade Marítima (SAM) tem 4 graus de prontidão que variam conforme a gravidade do derrame e em função do qual se aplica um plano de intervenção Local (jurisdição das Capitánias e dos portos nas áreas portuárias), Regional (jurisdição dos Departamentos Marítimos) ou Nacional.

Entretanto, com a aprovação do Plano Nacional da Política do Ambiente (PNPA) a 9 de Março de 1995 (Resolução do Conselho de Ministros nº 38/95 – ver anexo 2), começaram então a ser possíveis a recolha e tratamento de águas de lastro dos navios e hidrocarbonetos nos portos de comércio e pesca, através da criação de instalações específicas para as funções referidas. Saliente-se que o PNPA defende a criação nos portos de condições de exercício de actividades que reduzam os riscos de acidente nas várias fases do transporte marítimo, devido à proximidade de zonas costeiras e estuarinas de elevada sensibilidade ambiental. O PNPA determina também:

- uma análise da orla costeira de um ponto de vista da vulnerabilidade e sensibilidade relativamente a acidente de poluição com hidrocarbonetos;
- Reforço das medidas de fiscalização, controlo e punição de poluição com hidrocarbonetos de natureza não accidental;
- Preparação de cenários de contingência para diversas situações plausíveis de poluição.
- Potenciação dos meios de combate a situações de poluição.

Para a elaboração destas medidas, os recursos financeiros eram provenientes do fundo de coesão (apenas para o estudo de sensibilidade) e do Programa Comunitário ENVIREG, que permitiu o apetrechamento dos principais portos de meios de combate a poluições accidentais.

Só em Setembro de 2000 foi criado um novo decreto (Decreto-Lei n.º 46 619 de 26-9-2000 – ver anexo 3) que revoga o decreto de 71, estabelecendo agora um regime de contra-ordenações que para as pessoas colectivas aplica coimas de valores entre 10 mil e 500 mil contos. Até esta data, vários eram os navios que, em função da falta de regulamentação actualizada acrescida da falta de vigilância, aproveitava a costa portuguesa para fazer descargas.

Por exemplo: o petroleiro “Eva Cob”, estacionado em Sines em 90, esvaziou as águas de lastro, sujas de crude para o mar. Limpou assim os tanques e pôde partir imediatamente; pagou apenas mil contos de multa, poupando no custo de vários dias de permanência no porto e o preço de uma lavagem.

O equipamento actualmente disponível em Portugal para combate à poluição marítima pertence na sua maioria a organismos estatais. Encontra-se distribuído pelos cinco Departamentos Marítimos (Norte, Centro, Sul e Regiões Autónomas), e consiste em dispersantes, boomers, skimmers, e equipamento de limpeza da linha costeira. Também os portos possuem todos algum equipamento especializado em pequenos e médios derrames.

O processo da construção dos sistemas de controlo do tráfego marítimo VTS (vessel traffic system) compostos por uma rede de radares costeiros e sistemas de informação já se iniciou (a 24 de Novembro foi inaugurado o VTS Portuário de Leixões. Está já em funcionamento o VTS Portuário de Sines, aguardando-se para breve a entrada em funcionamento dos

VTS Portuários de Lisboa e Setúbal). Estes sistemas permitirão uma melhoria das condições de segurança da navegação a nível local e portuário, mas também a nível regional, permitindo um afastamento da costa do Esquema de Separação de Tráfego, minimizando assim as consequências costeiras, no caso de um derrame de crude. Este afastamento só é autorizado pela Organização Marítima Internacional (IMO) após a instalação dos referidos sistemas VTS.

Em Junho de 1999 realizou-se um protocolo entre os Ministérios da Defesa Nacional e do Ambiente no sentido de equipar e operar um navio de combate à poluição por hidrocarbonetos na orla costeira, equipado com dispersantes químicos, materiais de recolha, contenção, transvase e transporte dos materiais poluentes.

Têm havido exercícios de combate a poluição, importantes para treinar o pessoal, testar o equipamento, procedimentos e detectar falhas.

Refira-se que o cumprimento do PML exige a capacidade de recolha de emulsão de 1000 toneladas nas primeiras 24 horas, tendo nesse sentido o SCPMH apresentado uma proposta para, no âmbito do SAM ser apresentada uma candidatura a fundos Comunitários para a concretização da exigência referida.

## 1.2 CONVENÇÕES INTERNACIONAIS RATIFICADAS POR PORTUGAL

Existem diversos Acordos e Convenções Internacionais relacionados com os derrames de hidrocarbonetos, vários deles ratificados por Portugal.

No que respeita à preservação do meio marinho, Portugal aderiu à Organização Marítima Internacional (IMO) – trata-se de uma organização inter-governamental que desenvolve diversas acções relacionadas com a protecção da fauna e flora marinha, bem como a salvaguarda da vida humana.

Mais recentemente, a 3 de Dezembro de 1997, entrou em vigor para Portugal a Convenção das Nações Unidas sobre o Direito do Mar, assinada em Montego Bay, em 1982, em cujos princípios preambulares e, designadamente, a parte XII, sobre a protecção e preservação do meio marinho, estão previstos mecanismos de intervenção das autoridades costeiras e dos Estados de bandeira, fazendo uso de todos os meios disponíveis e possíveis, e esforçando-se por harmonizar as suas políticas a esse respeito.

Esta Convenção estabelece também que todas as actividades sob controlo e jurisdição de um determinado Estado não provoca qualquer tipo de danos a outros Estados.

Assim, a Convenção das Nações Unidas sobre o Direito do Mar considera como mais relevantes para a vigilância marítima três zonas: as Águas Territoriais, a Zona Contígua e a Zona Económica Exclusiva. Para além dos deveres já referidos, juntam-se também os direitos de usufruir dos recursos das zonas.

Mas também existem Convenções Internacionais específicas contra a poluição marinha proveniente de navios, às quais Portugal aderiu. Estas Convenções, consoante o tipo de poluição que abordam, podem ser sub-divididas em três categorias: poluição “voluntária”, poluição “acidental” e poluição “operacional”.

- **Poluição “voluntária”**

As Convenções englobadas nesta categoria visam essencialmente evitar as descargas efectuadas deliberadamente para o mar, com o intuito de eliminar determinados produtos.

Já em 6-12-72, no Decreto-Lei nº 491/72, Portugal ratificou a Convenção para a Prevenção da Poluição Marítima causada por Operações de Imersão efectuadas por Navios e Aeronaves – Convenção de Oslo. Esta Convenção proibiu a imersão de uma variedade de substâncias enumeradas nos seus anexos I e II e estabeleceu regras para incineração no mar.

Seis anos mais tarde, o Estado Português, através do Decreto-Lei nº 2/78 de 7 de Janeiro, ratificou a LDC 72 (London Dumping Convention) – Convenção Internacional para a Prevenção da Poluição Marinha causada por Operações de Imersão de Detritos e outros Produtos. Esta Convenção regula a poluição por alijamento, dos resíduos produzidos em terra e despejados no mar, bem como dos produtos produzidos por navios, aeronaves, plataformas ou outras estruturas construídas pelo Homem no mar.

Ainda em 78, Portugal ratificou mais uma Convenção sobre poluição marinha, no DL nº1/78 de 7 de Fevereiro. Tratou-se da Convenção para a Prevenção da Poluição Marinha de Origem Telúrica – PARIS 1974. Deste modo, as partes contratantes comprometem-se a eliminar a poluição de origem telúrica da zona marítima provocada pela substâncias enumeradas no seu anexo A.

- **Poluição “acidental”**

Com o intuito de abordar a problemática dos acidentes marítimos como naufrágios, abalroamentos, encalhes, colisões e explosões, são desenvolvidas várias Convenções às quais Portugal aderiu.

No que diz respeito à segurança da navegação e salvaguarda da vida humana, Portugal ratificou 3 Convenções: LL/LOAD LINES 1966, COLREG 1972 e SOLAS 1974.

A primeira, a Convenção Internacional das Linhas de Carga, foi ratificada por Portugal em 26-8-69 no DL nº 49209. Esta estabelece os limites máximos que um navio pode carregar, bem como outras regras referentes à estanqueidade.

A COLREG 1972 (Convenção sobre o Regulamento Internacional para Evitar Abalroamentos no Mar) reconheceu a criação de zonas de separação de tráfego, regras de rumo e governo e indicações técnicas para a utilização de faróis, marcas e sinais sonoros e luminosos. Esta Convenção contou com a adesão de Portugal em 27-6-78 (DL nº55/78).

Em 83, mais concretamente a 14 de Outubro através do DL nº 79/83, Portugal ratificou a SOLAS 1974, que é a Convenção Internacional para a Salvaguarda da Vida Humana no Mar. São definidas as normas mínimas para a construção, equipamento e emprego dos navios, compatíveis com a sua segurança, e é introduzido um sistema de inspecções anuais.

Ainda no que se refere aos acidentes marítimos, Portugal ratificou outras três Convenções, estas no que diz respeito às consequências dos acidentes: a CLC 1969, INTERVENTION 1969 e FUND 1971.

A 26 de Setembro de 1976 e no Decreto-Lei 694/76, Portugal ratificou a Convenção Internacional sobre a Responsabilidade Civil pelos Prejuízos devidos à Poluição por Hidrocarbonetos, denominada de CLC 1969. É assim proporcionado um

mecanismo de pagamento de indemnizações às pessoas afectadas pela contaminação dos hidrocarbonetos resultante dos acidentes referidos.

Três anos mais tarde, Portugal ratifica com o Decreto-Lei 88/79 a 21 de Agosto de 79 a INTERVENTION 1969 – Convenção Internacional sobre Intervenção em Alto Mar em caso de acidente que provoque ou possa vir a provocar a poluição por hidrocarbonetos.

Por último, a FUND 1971 (Convenção Internacional para a Constituição de um Fundo Internacional de Compensação pelos Prejuízos devidos à Poluição por Hidrocarbonetos) é ratificada a 21-6-85 pelo Decreto nº 13/85, permitindo uma cobertura dos prejuízos não cobertos pela CLC 1969, e transferindo parte do encargo financeiro do armador para o proprietário da carga sendo o Fundo criado participado pelas contribuições percentuais dos importadores de hidrocarbonetos.

- **Poluição “operacional”**

No âmbito de combater a poluição proveniente de exploração comercial dos navios, isto é, proveniente de descargas de água de lavagem e de lastro no mar e portos, foi ratificada em 1987 (DL 25/87 de 10 de Julho) a importante Convenção MARPOL 73/78, Convenção Internacional para a Prevenção da Poluição por Navios. A MARPOL é o tratado internacional no campo da poluição marinha, que regulamenta todas as formas de poluição marinha excepto as disposições referentes aos resíduos produzidos em terra e despejados no mar.

É composta por 20 artigos, 5 anexos e 2 Protocolos. Reforça os poderes dos Estados Contratantes e impõe uma série de regras, disposições e medidas restritivas a todos os navios, e não apenas aos petroleiros. Assim, todos os navios são obrigados a possuir equipamentos de separação de hidrocarbonetos/água, critérios de descargas (através do conceito de “áreas especiais”, que são zonas particularmente sensíveis e nas quais as descargas são proibidas), existência de livros de registos e certificados, e aparelhos de monitorização. Ao nível dos Estados, é estabelecido um regime de compromisso ambiental gerindo o equilíbrio entre os Estados da bandeira do navio e os Estados marítimos onde esses navios operam.

Em suma, esta Convenção pretende proteger o meio marinho, através de medidas que evitem tornar a actividade marítima demasiado dispendiosa. Cerca de 90% da frota mercante mundial é coberta por esta Convenção.

Estão a ser desenvolvidas Emendas a esta Convenção, alargando o seu âmbito, estabelecendo a criação de planos de emergência de poluição por hidrocarbonetos para navios, e impondo construção obrigatória de navios com duplo casco e de convés com design de média altura, no sentido de limitar a quantidade de óleo eventualmente derramado em caso de acidente

Já em 1997, mais uma Convenção foi ratificada, nomeadamente a Convenção para a Protecção do Meio Marinho do Atlântico Nordeste – OSPAR (assinada em Paris em 1992). Esta foi ratificada em 31 de Dezembro através do Decreto-Lei nº 59/97, e substitui as Convenções de Oslo 1972 e Paris 1974. As partes contratantes comprometeram-se a tomar todas as medidas possíveis para prevenir e combater a poluição, bem como as medidas necessárias à protecção da zona marítima contra os efeitos prejudiciais das actividades humanas, de forma a salvaguardar a vida do Homem e preservar ecossistemas marinhos. Esta Convenção estabeleceu também os princípios de precaução e do poluidor-pagador.

### 1.3 POLÍTICA EUROPEIA

As partes contratantes das Convenções, muitas vezes não estão em posição de, isoladamente, tomar medidas eficazes e adequadas à problemática da poluição dos mares, já que pode ter consequências para além do próprio país. Assim, o desenvolvimento de acções preventivas a nível comunitário será certamente mais eficaz.

Foi com este intuito que em 26 de Junho de 1978 através de Resolução do Conselho se criou o programa de acção das comunidades europeias em matéria de controlo e de redução da poluição causada pelos derrames de hidrocarbonetos no mar.

Já em 76, a 4 de Maio, o Conselho havia emitido uma directiva (76/464/CEE) no sentido de reduzir a poluição causada por determinadas substâncias perigosas lançadas no meio aquático da Comunidade. Para tal, estabeleceram-se duas listas de substâncias perigosas (lista I – inclui hidrocarbonetos persistentes – e lista II – inclui hidrocarbonetos não persistentes), em que os Estados-Membros se comprometeram a eliminar lançamentos de substâncias da lista I e reduzir lançamentos de substâncias da lista II.

A Comissão Europeia desenvolveu também acções no sentido de permitir aos estados membros uma melhor capacidade de resposta a este tipo de acidentes e uma cooperação entre os estados. Mais concretamente, o programa de formação, o sistema comunitário de informação, task force comunitária, cooperação internacional e projectos pilotos.

O programa de formação consistiu na criação de cursos gerais sobre a luta contra a poluição no mar, assim como cursos especializados, seminários, estágios e exercícios. Desta forma, são criadas condições para a formação e recrutamento de pessoal de alto nível para assumir responsabilidades no domínio da poluição marítima dos diferentes Estados membros, de modo a que as equipas de intervenção reajam de forma rápida e eficaz caso sejam chamadas a actuar.

O sistema comunitário de informação tem permitido a criação de um inventário dos meios de luta disponíveis nos Estados membros, um catálogo desses meios, e uma base de dados das propriedades, comportamento e impacte dos hidrocarbonetos na fauna e flora. Desta forma, é permitida às autoridades nacionais uma melhor gestão da crise.

O desenvolvimento de uma task force comunitária permitiu a composição de um grupo de peritos governamentais com experiência em situações de urgência no que diz respeito a acidentes graves. Assim, caso as autoridades operacionais pelo combate à poluição necessitem, alguns destes elementos poderão ser chamados a actuar.

A cooperação internacional desenvolvida pela Comissão tem permitido o desenvolvimento de vários acordos regionais, com vista à cooperação no que diz respeito à poluição marítima accidental. Sendo a União Europeia parte Outurgante de todos esses Acordos, a sua principal função é a de garantir uma coerência nas acções nos diferentes Acordos.

Foi neste âmbito que em 1990 foi criado o Acordo de Lisboa, após proposta de Governo Português, e ao qual Portugal está, desde a sua assinatura, associado aos países da bacia do Mediterrâneo nordeste, que inclui a Espanha, França e Marrocos, sendo assegurado o seu funcionamento pela CILPAN ( Centro Internacional de Luta Contra a Poluição do Atlântico Nordeste ), sediado no nosso país. Tendo sobretudo um carácter de coordenação e difusão entre estes países, o CILPAN centraliza as informações sobre os acidentes com hidrocarbonetos e presta assistência em casos de urgência, podendo chegar a fornecer, se assim se justificar, meios adicionais de combate. Esta estratégia evita uma concentração de equipamentos e meios logísticos, atenuando assim os custos de gestão.

O Acordo de Lisboa será essencialmente um mecanismo que assegurará a cooperação entre as Partes Contratantes no caso de se dar um acidente de poluição. O Acordo impõe às partes Contratantes a obrigação de criarem os seus próprios organismos de intervenção e de porem em acção os seus próprios planos nacionais de intervenção. Este acordo foi ratificado em Portugal com o Decreto nº 37/91 de 18 de Maio, mas Espanha e Marrocos ainda não o fizeram.

Foram também desenvolvidos pela acção Comunitária projectos-piloto para permitir uma melhor intervenção e capacidade de luta contra a poluição marítima dos estados membros. Foram assim disponibilizados recursos para o desenvolvimento de modelos matemáticos para prever a evolução da poluição causada pelos derrames, tele-deteccção no mar a partir de aeronaves, métodos de contenção e recuperação no mar de manchas poluentes e limpeza das costas. Nos últimos tempos, têm sido desenvolvidos projectos-piloto relacionados com métodos de recuperação biológica e biorremediação e sua possível aplicação e integração com os métodos de combate disponíveis.

A 20 de Dezembro de 2000, e 22 anos após a criação da acção comunitária no domínio da poluição marinha, é estabelecido um novo quadro comunitário de cooperação entre os Estados-Membros no domínio da poluição marinha accidental ou deliberada, através da Decisão nº 2850/2000/CE do Parlamento Europeu e do Conselho (ver anexo 4).

A decisão pretende aperfeiçoar e reforçar as acções desenvolvidas na anterior acção comunitária e integrá-las num quadro de cooperação único, que abrange o período de 1 de Janeiro de 2000 até 31 de Dezembro de 2006. Assim, o quadro de cooperação destina-se a:

- completar os esforços empreendidos pelos Estados-Membros a nível nacional, regional e local em favor da protecção do ambiente marinho, da saúde humana e dos litorais contra os riscos de poluição accidental ou deliberada no mar;
- reforçar a cooperação e a assistência mútua entre os Estados-Membros neste domínio, com vista à reparação dos danos em conformidade com o princípio "poluidor-pagador";
- melhorar a capacidade de intervenção dos Estados em caso de derrame accidental de substâncias nocivas no mar.

O quadro de cooperação está centralizado no sistema comunitário de informação, que utiliza um sistema moderno de tratamento de dados – criação de um site na Internet alimentado a nível comunitário, e onde estão disponíveis as informações sobre cada Estado-Membro no que diz respeito às estruturas e autoridades nacionais existentes no domínio da poluição marinha, aos equipamentos disponíveis para as intervenções de emergência e a despoluição, bem como às modalidades de assistência.

No anexo II da Decisão são apresentados os tipos de acções e as respectivas condições de financiamento previstas pela Comunidade:

- Acções de Formação e informação
- Acções para a melhoria de técnicas e métodos de resposta e recuperação
- Acções de apoio e informação



- Mobilização de peritos

## 2 Características e propriedades dos hidrocarbonetos

O petróleo é uma mistura líquida complexa de diversos compostos, entre os quais oxigénio, azoto, enxofre, vanádio, níquel, sais minerais, etc. Contudo, a grande maioria (cerca de 75%) dos compostos do petróleo são hidrocarbonetos. “Hidrocarbonetos” ou óleos são termos vulgarmente utilizados para referirem o petróleo sob qualquer forma, incluindo o petróleo bruto, seus derivados pesados (crudes) e produtos refinados.

### 2.1 COMPOSIÇÃO QUÍMICA

Os crudes diferem bastante na sua composição, podendo apresentar uma gama alargada de propriedades, enquanto que os produtos refinados são controlados, sendo muitas vezes enriquecidos com determinados compostos, como as oleofinas que se formam durante o cracking. Assim, os produtos refinados passam a ter características bem definidas.

- Famílias químicas de hidrocarbonetos

Os hidrocarbonetos podem ser agrupados em cinco categorias diferentes, consoante a sua composição química: alcanos, naftenos, aromáticos, alcenos e asfaltenos.

Os alcanos são hidrocarbonetos estáveis e saturados que apresentam ligações C-C simples, com a estrutura-tipo  $C_nH_{2n+2}$ . São também conhecidos por parafinas, sendo o principal constituinte do petróleo.

Os naftenos são também compostos orgânicos saturados, contudo apresentam terminais ligados numa estrutura anelar, sendo a sua fórmula geral:  $C_nH_{2n}$ . São insolúveis na água.

Os hidrocarbonetos saturados (tanto os alcanos como as naftenos) de menor peso molecular ( $<C_{18}$ ) são os componentes mais passíveis de dispersão dos óleos, enquanto que as maiores moléculas saturadas (ceras) podem provocar anomalias nos processos de evaporação, dispersão e emulsificação.

Os compostos orgânicos aromáticos são caracterizados por possuírem pelo menos um anel benzénico na sua estrutura. Os pequenos aromáticos (um ou dois anéis) são solúveis na água, sendo também rapidamente evaporáveis, ao contrário dos maiores aromáticos que não apresentam nenhuma das características referidas anteriormente.

Os aromáticos de baixo ponto de ebulição são responsáveis pela toxicidade da maior parte dos óleos, sendo os aromáticos de elevado ponto de ebulição suspeitos de provocarem cancro e de serem venenos persistentes.

Os alcenos são compostos não-saturados, que possuem pelo menos uma ligação dupla entre átomos de carbono, com a seguinte fórmula geral:  $C_nH_{2n}$ . Estes compostos encontram-se nos produtos refinados.

Os asfaltenos são compostos com elevados pesos moleculares e definição imprecisa. Contêm S, N e O, podendo também estar associados a metais como o Níquel e Cádmio. Não sofrem uma evaporação, degradação ou dispersão significativa, contribuindo para a formação de emulsões água-no-óleo estáveis quando em percentagens superiores a 3%.

- Compostos sulfurosos

O conteúdo sulfuroso num petróleo bruto é importante por diversas razões. Processos como o cracking catalítico e refinação são afectados por elevados conteúdos sulfurosos. Durante um derrame de óleo, o conteúdo sulfuroso torna-se uma preocupação para o pessoal da limpeza, por questões de saúde e segurança. Adicionalmente, a queima de óleos com elevado conteúdo sulfuroso pode libertar níveis perigosos de SO<sub>2</sub>.

- Compostos orgânicos voláteis

Benzeno, tolueno, etilbenzeno, xilenos (BTEX) e benzenos substituídos são os compostos aromáticos voláteis mais comuns no petróleo. Estes são a fracção mais móvel e solúvel dos produtos petrolíferos, e como tal, frequentemente penetram no solo, sedimentos e águas superficiais devido a determinados acidentes. BTEX são compostos carcinogénicos e neurotóxicos, sendo os principais poluentes resultantes de derrames de produtos petrolíferos.

- Elementos metálicos

O teor em metais pode fornecer informações importantes acerca da origem dos óleos. Os principais elementos metálicos encontrados são o níquel, vanádio, ferro e cobre. O níquel e vanádio têm efeitos prejudiciais nos catalisadores usados nos processos de cracking e dessulfurização.

## 2.2 PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS

- Densidade

A densidade é definida como a massa por unidade de volume de uma substância. É frequentemente apresentada para os óleos em g/mL ou g/cm<sup>3</sup>, ou ainda em kg/m<sup>3</sup>. O óleo flutuará na água caso a sua densidade seja inferior à densidade da água. Alguns crudes e fuel-óleos residuais podem apresentar densidades superiores a 1.0 mg/L, e o seu comportamento dependerá da salinidade e temperatura da água.

Para além da densidade do óleo depender da temperatura do mesmo, também aumenta após o derrame, devido à evaporação das fracções voláteis (menos densas). Após evaporação considerável, a densidade de alguns óleos pode mesmo aumentar o suficiente para que estes se afundem na coluna de água.

A gravidade específica e a gravidade API (American Petroleum Institute) são propriedades relacionadas com a densidade e que são frequentemente utilizadas. A gravidade específica (ou densidade específica) é a razão entre a densidade do óleo e a densidade da água pura, a uma dada temperatura. A gravidade API é mais frequentemente utilizada na indústria petrolífera do que a densidade, e refere-se a uma temperatura de 15° C, sendo calculada da seguinte forma:

$$GravidadeAPI(^{\circ}) = \frac{141.5}{GravidadeEspecífica(15^{\circ}C)} - 131.5$$

Geralmente, os preços dos produtos petrolíferos são baseados na gravidade API, sendo que aqueles que apresentam valores API mais elevados (e portanto menores densidades) são, geralmente, mais caros. Os óleos podem também ser agrupados consoante a sua gravidade API:

Grupo	°API (60°F)
I	> 45.0
II	35.0 – 45.0
III	17.5 – 35.0
IV	17.5 – 10.0
V	<10.0

*Tabela 1 - Classificação dos óleos com base na gravidade API*

- Viscosidade

A viscosidade é a medida de resistência do fluido ao movimento; quanto menor a viscosidade, mais facilmente o produto flui. Tal como a densidade, a viscosidade é influenciada pela temperatura e pelo envelhecimento do óleo, diminuindo com o aumento da temperatura e aumentando com o envelhecimento do óleo.

Esta propriedade influencia o grau de espalhamento, a penetração no solo ou nos sedimentos e a selecção de equipamento mecânico para aspiração do produto.

- Distribuição dos pontos de ebulição

Ponto de ebulição é a temperatura em que se dá a transformação da fase líquida na fase de vapor. A distribuição dos pontos de ebulição de um produto é bastante utilizada na indústria de refinação do petróleo para avaliar novos produtos e a qualidade, quer na compra, quer durante o transporte, e ainda para fornecer informação quanto à maximização dos resultados no processo de refinação.

Para objectivos de análise dos óleos para fins ambientais, este tipo de informação fornece uma indicação da volatilidade e distribuição dos componentes do produto, permitindo uma previsão da evolução do processo de evaporação. Geralmente, a distribuição dos pontos de ebulição é determinada por destilação.

- Ponto de inflamação

O ponto de inflamação de um óleo é a temperatura a partir da qual se libertam vapores susceptíveis de se inflamarem, quando expostos a uma fonte de ignição. Este é um factor extremamente importante em relação à segurança das operações de limpeza do derrame.

Gasolinas e outros fuel-óleos leves podem facilmente inflamar-se em muitas condições ambientais, e assim colocar um sério perigo quando derramados. Muitos óleos-crude também têm pontos de inflamação baixos, até ao momento em que os componentes mais voláteis se evaporam ou se dispersam.

- Ponto de fluidez ou corrimento

O ponto de fluidez é a menor temperatura à qual o óleo flui, em condições de teste padrão. Acima dessa temperatura o óleo torna-se um semi-sólido ou plástico, geralmente devido à separação das ceras do óleo, ou no caso de produtos muito viscosos, devido ao efeito da viscosidade. Para fuel-óleos residuais, os pontos de fluidez podem estar relacionados com o grau de aquecimento e arrefecimento a que os produtos foram sujeitos.

Do ponto de vista de resposta a um derrame, convém referir que o ponto de fluidez depende de várias condições, pelo que esta propriedade é uma indicação e não uma medida exacta da temperatura à qual o produto deixa de fluir.

#### Tensão Interfacial

A tensão interfacial é a força de atracção entre as moléculas na interface entre dois fluidos, sendo que na interface ar/líquido esta força é frequentemente referida como tensão superficial. A tensão interfacial é usualmente expressa em dyne/cm (mN/m).

Conjuntamente com a viscosidade, a tensão superficial afecta o espalhamento do óleo na água. Baixas tensões superficiais correspondem a graus de propagação maiores.

- Solubilidade

Certos hidrocarbonetos dissolvem-se na água, tais como os aromáticos ligeiros e algumas parafinas. Estes possuem elevada solubilidade, pelo que após o derrame podem ser rapidamente dissolvidos, especialmente em condições de mar agitado. Os compostos mais solúveis são também os que apresentam pontos de ebulição mais baixos, podendo também ser rapidamente evaporados. Na realidade, a solubilidade de um petróleo na água é muito baixa.

- Formação de emulsões

Uma emulsão água-no-óleo é uma dispersão estável de pequenas gotículas de água no óleo. Quando formadas, estas emulsões podem apresentar características muito diferentes dos óleos antes da emulsificação. Este aspecto tem

implicações importantes no comportamento do óleo derramado e subsequentes operações de limpeza, sendo assim importante conhecer se o óleo tende a formar emulsões estáveis, e qual o conteúdo máximo em água das mesmas.

## **3 Principais Métodos de Resposta a um Derrame de Petróleo**

### **3.1 DISPERSANTES QUÍMICOS**

Os dispersantes são um grupo de químicos que, ao serem pulverizados nas manchas de óleo, aceleram o processo de dispersão natural. A sua aplicação visa remover o óleo da superfície, particularmente quando a remoção mecânica não é possível, minimizando os impactes do óleo flutuante, por exemplo para aves ou zonas costeiras sensíveis.

Estes químicos têm dois componentes essenciais, surfactantes e solventes. Os agentes surfactantes são moléculas com afinidade para dois líquidos distintos que não se misturam, agindo como uma interface entre eles, reduzindo neste caso a tensão interfacial óleo-água, permitindo que o óleo penetre na água como pequenas partículas mais facilmente degradadas bactérias naturais.

A existência de solventes permite que os surfactantes (ingredientes activos) sejam aplicados na forma de spray, e facilitam a sua penetração no filme de óleo até à coluna de água.

Assim, os dispersantes químicos podem ser aplicados por pulverização através de navio, avião, helicóptero, preferencialmente sob a forma de spray. Os navios são mais adequados para derrames em portos ou águas interiores, enquanto que helicópteros e aviões com apenas um motor são mais eficazes para pequenos derrames e em zonas costeiras. Os maiores aviões têm mais utilidade para derrames de grande dimensão.

A aplicação de dispersantes depende essencialmente de quatro factores: tipo de óleo, condições do tempo, dimensão e localização da mancha e tipo de embarcações e aeronaves disponíveis para a aplicação de dispersantes.

Os dispersantes são pouco eficazes em óleos pesados pouco viscosos e flutuantes, uma vez que os dispersantes acabam por passar do óleo para a água antes da penetração do solvente. Da mesma forma, após a formação de emulsões viscosas óleo-na-água, a eficácia dos dispersantes torna-se muito reduzida, sendo por isso a sua aplicação inadequada para óleos envelhecidos.

A existência de agitação marítima também facilita a eficácia dos dispersantes.

Uma vez afundado, o óleo cobre os sedimentos do fundo do mar e destrói a vida aí existente no espaço de alguns meses. Portanto, a utilização de dispersantes químicos deve ser cuidadosa – tendo em conta as prioridades no que toca a recursos que devem ser protegidos –, bem como rápida, uma vez que após algum tempo a utilização de dispersantes é ineficaz.

### **3.2 RECUPERAÇÃO MECÂNICA**

A recuperação mecânica é o método ideal de combate a derrames em termos ambientais, pois consiste na recolha do óleo da água sem quaisquer tipo de impactes. A utilização de barreiras flutuantes de retenção pode evitar que a mancha atinja locais sensíveis, sendo habitualmente associadas à utilização de skimmers para a recolha do óleo. Esta recolha também pode ser feita com materiais absorventes, habitualmente utilizados em derrames pequenos, estágios finais de limpeza, ou para proteger zonas mais sensíveis. As principais desvantagens deste método residem na dificuldade da sua aplicação em manchas de espessura muito fina, condições atmosféricas de elevado vento, ou forte agitação marítima.

### 3.3 QUEIMA IN-SITU

Queima in-situ é a denominação dada ao processo de combustão da mancha de óleo no mar, próximo ou mesmo no local do derrame. Esta técnica pode ser vista como uma forma simples de remover quantidades significativas de óleo da superfície. Contudo, diversos problemas limitam a viabilidade deste método. Entre eles encontram-se a ignição do óleo, manutenção da combustão da mancha, a geração de enormes quantidades de fumo, formação de resíduos extremamente densos e viscosos com forte potencial para se afundar, aumento de solubilidade de componentes tóxicos devido às altas temperaturas atingidas, e preocupações com a segurança.

O estado do mar também pode condicionar a aplicação deste método. Forte agitação marítima pode mesmo extinguir a combustão. Em manchas com espessura muito fina a combustão também é dificultada, devido à menor temperatura do óleo. Como resultado, uma quantidade significativa de óleo pode permanecer na superfície, sem ser queimado.

### 3.4 BIORREMEDIAÇÃO

Biorremediação é o termo utilizado para descrever um número de processos que podem acelerar a biodegradação natural, decompondo o petróleo em substâncias mais simples como água, biomassa ou dióxido de carbono. A biodegradação ocorre como resultado da oxidação de certos componentes do óleo derramado, através de bactérias, fungos, algas unicelulares e protozoários. A taxa de biodegradação é limitada por diversos factores incluindo a temperatura, níveis de micróbios, nutrientes e oxigénio presente. Outros factores, tais como a composição química do óleo e o seu estado de envelhecimento também são importantes.

Entre os processos de biorremediação, encontram-se a bio-estimulação e a bio-ampliação. A bio-estimulação consiste na aplicação de nutrientes, optimizando os níveis de carbono, azoto e fósforo, com o objectivo de acelerar a taxa de degradação pelas comunidades de micróbios indígenas. A bio-ampliação, por sua vez, não é mais que a adição de microrganismos capazes de degradar o óleo.

Embora a ideia da biorremediação seja atractiva, o seu uso prático é restrito, uma vez que se trata de um processo demasiado lento. Assim, este processo não deve ser usado para manchas à superfície, visto que os materiais adicionados são rapidamente diluídos e perdidos da mancha, sendo mais adequado para zonas costeiras contaminadas com óleo.



## 4 Descrição Geral do Sistema MOHID

O desenvolvimento deste sistema iniciou-se em na década dos 80 (Neves, 1985), tendo vindo a ser objecto de sucessivos aperfeiçoamentos na sequência da sua aplicação a diferentes projectos, científicos e tecnológicos. Hoje em dia pode ser classificado com um dos mais elaborados entre os sistemas existentes deste tipo, nomeadamente atentado a são inovação face a descrição vertical e a sua programação robusta e fiável.

O sistema *Mohid* é programado recorrendo a programação orientada por objectos, utilizando o *ANSI Fortran 95*. A divisão do sistema é feita em módulos, podendo cada módulo ser entendido com um modelo, sendo no entanto o sistema composto por um único executável. A utilização do *ANSI Fortran 95* garante a independência do sistema *Mohid* face ao sistema operativo em qual se pretende executar o modelo (*Windows, Linux, Unix, etc.*) e uma fácil implantação do código em qualquer ambiente. O tempo de execução do programa (tempo simulada versus tempo da unidade central de processamento) varia em função da grid e do passo de tempo utilizado. A possibilidade de correr os vários módulos (hidrodinâmica, turbulência, deriva, etc.) que compõe o sistema *Mohid* com passos de tempo diferentes, permite ao utilizador obter resultados num reduzido espaço de tempo. Todo o modelo utiliza a alocação dinâmica da memória, tornando-se assim mais versátil, podendo para qualquer tipo de simulação sempre ser utilizado o mesmo executável do programa.

O sistema *Mohid* pode ser dividido em quatro grandes classes: as duas primeiras gerem as propriedades do escoamento não turbulentas (ex. velocidade, elevação, viscosidade turbulenta, fluxos de água) e turbulentas (viscosidades, difusividades, energia cinética turbulenta, comprimentos de mistura, etc.), as outras duas as propriedades da água (ex. salinidade, temperatura, densidade, amónia, sedimentos coesivos). As três primeiras classes calculam a evolução das propriedades relativamente a um referencial Eulereano e a discretização das equações é feita em volumes finitos. Esta metodologia consiste em aplicar as leis (físicas, químicas e biológicas), que regem os processos que se pretendem simular, directamente a um volume de controlo na forma de uma divergência de um fluxo. Como consequência automaticamente este método garante a conservação de massa das propriedades simuladas (Adcroft *et al.*, 1997). A última classe utiliza um referencial lagrangeano para calcular a evolução das propriedades da água neste caso outra propriedade importante é a localização da massa de água. Esta classe evolui de um modelo de partículas utilizado nas versões anteriores do *Mohid* (Leitão, 1997). Hoje em dia o modelo lagrangeano pode ser utilizado para simular processo de qualidade de água, tal como a deriva de manchas de petróleo.

As quatro grandes classes acima referidas são divididas por mais de 40 módulos, que constituem o sistema *Mohid* complementado no total mais de 140 mil linhas de código. A programação orientada por objectos utilizada na programação do modelo torna a sua utilização, tal como a sua expansão, muito robusto (Miranda *et al.*, 2000). Este tipo de programação tem provado ser uma metodologia muito útil no desenvolvimento de programas complexos, em especial para aqueles que têm por objectivo simular problemas “do mundo real” (Decyk *et al.*, 1998). A modelação de processos marinhos ou estuarinos são exemplos de problemas “do mundo real”, pode-se dizer que uma das razões para o sucesso deste tipo de programação deste tipo de problemas tem uma raiz intuitiva. A comunicação entre os módulos é feita numa base de cliente/servidor garantindo assim o encapsulamento da informação de cada módulo (Duffy, 1995).

Ao longo da sua existência, o modelo *Mohid* já foi utilizado em inúmeros casos de estudo, entre os quais se podem encontrar zonas com características muito diferentes, como é o caso do oceano profundo (Atlântico Nordeste no âmbito do projecto *Omex* (Coelho et al., *submitted*) e o Mediterrâneo no âmbito do projecto *EuroModel*), zonas costeiras (portos da costa Portuguesa e Brasileira), zonas estuarinas (estuários portugueses no âmbito da definição dos limites das estuários, estuários Brasileiros e Angolanos), *Ria de Aveiro* e albufeiras (albufeira de *Alqueva* no Sul de Portugal).

## 5 Módulo Hidrodinâmico

O módulo hidrodinâmico do sistema Mohid resolve as equações primitivas do movimento no espaço tridimensional. A discretização espacial destas equações é feita utilizando uma técnica de volumes finitos a qual permite a utilização de um sistema de coordenadas verticais genérico. A discretização temporal é baseada na utilização de um esquema semi-implícito.

O modelo permite a consideração de condições de fronteira abertas ou fechadas. As condições de fronteira abertas podem ser do tipo nível imposto, radiativas ou um misto das duas.

A versatilidade do módulo hidrodinâmico permite que se proponha esta como a única ferramenta para simular o escoamento em todos os locais onde serão elaborados cenários de derrames independentemente da complexidade da respectiva geometria.

No texto que se segue é apresentada uma descrição do modelo incluindo as equações resolvidas, o fecho turbulento, as condições de fronteira aberta e a geometria vertical do modelo.

### 5.1 EQUAÇÕES RESOLVIDAS

As equações resolvidas pelo módulo hidrodinâmico têm todas por base a equação que descreve na forma integral da evolução de uma variável genérica  $P$ , no interior de um volume de controlo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V P dV = - \oint_A \vec{F} \cdot d\vec{A} + \text{Fontes} - \text{Poços} \quad (1)$$

sendo  $A$  a superfície que define a fronteira do volume controlo e  $V$  o integral de superfície de  $\vec{F}$  corresponde ao fluxo da propriedade  $P$  através de  $A$ .

O módulo hidrodinâmico tem como objectivo simular a evolução das propriedades do escoamento. As velocidades segundo  $X$  e  $Y$  (horizontais) são umas dessas propriedades, as quais são calculadas com base na equação (1) e admitindo que:

$$P = \rho \cdot \vec{v} \wedge \vec{F} = P \cdot (\vec{v} \cdot \vec{h}) = \rho \cdot \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{h})$$

$$\text{Fontes} - \text{Poços} = \sum \text{Forças} = \text{Gravíticas} + \text{Pressão} + \text{Viscosas}$$

As forças gravíticas englobam as forças de atracção gravítica exercidas sobre o volume de controlo em estudo pelo planeta

Terra  $\left( \vec{g} \int_V \rho dV \right)$ , pela Lua e pelo Sol (potencial da maré).

O potencial de maré é um termo que adquire importância em domínios de grandes dimensões, da ordem das centenas de km, sendo resolvido com base na formulação proposta por Choi et al. (1997).

As forças de pressão e as forças viscosas são exercidas sobre a superfície fronteira do volume de controlo e resultam da interacção deste com o meio envolvente. As forças de pressão são normais à superfície de fronteira  $\left( - \int_A p \cdot \vec{n} dA \right)$  enquanto que as forças viscosas  $\left( \int_A \vec{\tau} dA \right)$  podem ser subdivididas em tangenciais e normais.

No que diz respeito às forças viscosas tangenciais é necessário definir condições de fronteira no fundo e à superfície. No fundo é utilizada uma lei quadrática em que a tensão de corte é igual ao coeficiente Chezy vezes o quadrado da velocidade. Na superfície, caso um dos agentes forçadores seja o vento, a tensão de corte é a tensão de corte do vento caso contrário o seu valor é nulo.

Outra propriedade fundamental a ter em consideração é a nível da superfície livre cuja evolução é calculada com base na equação (1) admitindo que o meio é 2D, isto é, a sua evolução só é condicionada pelos fluxos de água. Neste caso os termos da equação podem-se escrever na forma:

$$P = \rho \wedge \vec{F} = \rho \cdot \vec{v}$$

Fontes – Poços = Descargas + Precipitação - Evaporação

A equação (1) torna-se então numa equação de conservação de massa 2D:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_A \rho \vec{v} \cdot d\vec{n} + \text{Descargas} + \text{Precipitação} - \text{Evaporação} \quad (2)$$

Ao contrário da equação anterior em que a propriedade transportada era a incógnita, aqui a propriedade é conhecida ( $\rho$ ) e a incógnita é o próprio volume de controlo.

Uma vez que se trata de um abordagem 3D é ainda necessário especificar uma equação para o cálculo da velocidade vertical, a qual é obtida a partir da equação de conservação de massa anteriormente descrita admitindo a hipótese hidrostática.

## 5.2 PRINCIPAIS APROXIMAÇÕES

A equação (1) aplicada à conservação de quantidade de movimento é válida para um referencial fixo. No entanto, o referencial natural, a Terra, está em permanente rotação, sendo o efeito desta rotação sobre o escoamento usualmente contabilizado na forma de uma força inercial denominada força de Coriolis.

Outra aproximação, usualmente efectuada na aplicação da lei de conservação de quantidade de movimento a escoamentos oceânicos e costeiros, explora o fato das variações de densidade da água nestes casos ser muito pequena, menos de 3%. Neste caso a densidade pode ser considerada constante para o cálculo da sua massa e forças de inércia, excepto para as forças que são função da aceleração da gravidade. A esta simplificação chama-se aproximação de Boussinesq.

Uma terceira simplificação adoptada tem em consideração que, no oceano e em águas costeiras, as escalas na vertical são pequenas e, consequentemente, o escoamento tem de uma forma geral velocidades muito baixas nessa direcção. Para além da dimensão das escalas verticais a estratificação vertical de densidade estável tem também um papel importante, porque tende a inibir qualquer movimento vertical por acção da impulsão. As acelerações verticais são baixas tal como as forças viscosas. O fluido por sua vez, no que diz respeito aos movimentos verticais, comporta-se como se estivesse num equilíbrio estático. Nestas condições é válida a hipótese hidrostática, isto é, é possível desprezar todos os termos de inércia e admitir que o gradiente de pressão vertical está em equilíbrio com a força da gravidade. A pressão, no caso da hipótese hidrostática, é então apenas função da profundidade e do gradiente vertical de densidade.

Na discretização do termo de pressão optou-se pela divisão deste numa componente barotrópica e outra baroclínica. A primeira contabiliza o efeito do gradiente de nível sobre a pressão, enquanto a segunda contabiliza o efeito do gradiente de densidade. Esta divisão permite correlacionar directamente a variação da superfície livre com a pressão (barotrópica). Desta forma a superfície livre pode ser utilizada para calcular o volume de controlo e simultaneamente servir como estimativa da pressão barotrópica. Por outro lado, podem-se aplicar métodos numéricos diferentes a cada um dos termos.

Na perspectiva da oceanografia, esta divisão pode também ser encarada como uma divisão de modos: a pressão barotrópica força o modo externo, responsável por simular as ondas gravíticas da superfície livre (*cf. Figura 1*) que apresentam uma celeridade muito superior à dos modos internos. Estes últimos, do ponto de vista físico têm um número infinito e são forçados pela pressão baroclínica, sendo a sua fase visível a propagação das chamadas ondas internas (*cf. Figura 2*).

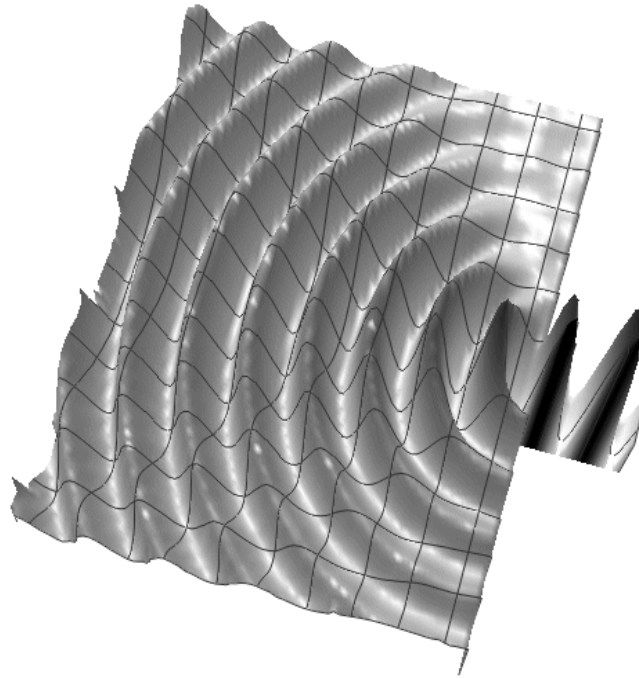


Figura 1- Propagação de uma onda de superfície livre simulada pelo sistema Mohid. Neste caso esquemático a onda é imposta num pequeno canal situado no lado direito do domínio e radiada pelas outras três fronteiras.

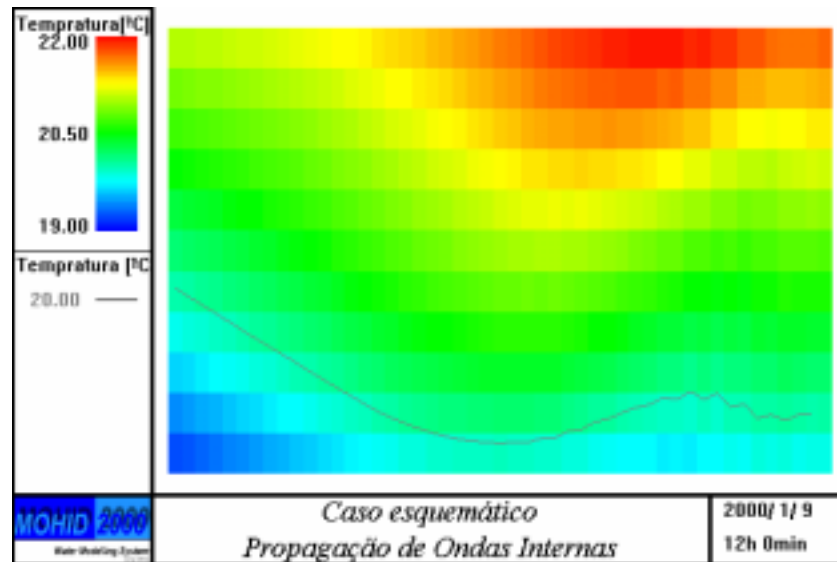


Figura 2- Propagação de uma onda interna simulada pelo sistema Mohid. Simulação da propagação de ondas internas ao longo de um canal com 50 km e 1000 m de profundidade com uma estratificação inicial linear de temperatura (24°C à superfície e 4 °C no fundo). A figura mostra a variação da isolinha dos 20 °C ao longo de todo o canal e entre os 150 e 250 m de profundidade. O canal tem fronteira aberta (radiação) do lado direito e fechada do lado esquerdo, as ondas internas são formadas extraíndo, nas três primeiras células a contar do lado esquerdo, calor da superfície a uma taxa de 300 W/m<sup>2</sup>.

A consideração das aproximações à lei de conservação de quantidade de movimento, apresentadas anteriormente, dão origem à equação (3).

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \int_V \vec{v} dV = & - \oint_A (\vec{v} \cdot \vec{n}) d\vec{n} + \oint_A v_T \frac{\partial(\vec{v})}{\partial n} d\vec{n} - \underbrace{g \oint_A (\eta - z) \cdot d\vec{n}_x}_{\text{Força barotrópica segundo X}} - \underbrace{g \oint_A \left( \int \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} dz \right) \cdot d\vec{n}_x}_{\text{Força baroclínica segundo X}} \\
 & - \underbrace{g \oint_A (\eta - z) \cdot d\vec{n}_y}_{\text{Força barotrópica segundo Y}} - \underbrace{g \oint_A \left( \int \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} dz \right) \cdot d\vec{n}_y}_{\text{Força baroclínica segundo Y}} - \underbrace{\oint_A p_{atm} d\vec{n}_x}_{\text{pressão atmosférica X}} - \underbrace{\oint_A p_{atm} d\vec{n}_y}_{\text{pressão atmosférica Y}} \\
 & + \int 2\vec{\Omega} \times \vec{v} dV + \text{Potencial da Maré} \tag{3} \\
 & \underbrace{\quad}_{\text{Força de coriolis}}
 \end{aligned}$$

O módulo hidrodinâmico resolve assim a equação de conservação de quantidade de movimento 3D (3) para calcular as componentes horizontais da velocidade e uma equação de conservação de massa (2), para um meio 2D, para calcular a variação da superfície livre no tempo. Finalmente resolve mais uma vez a equação (2), agora para um meio 3D, para calcular a velocidade vertical do escoamento.

A densidade é calculada com base na equação de estado para a salinidade e a temperatura (Leendertsee e Liu, 1978):

$$\rho = (5890 + 38T - 0.375T^2 + 3S) / ((1779.5 + 11.25T - 0.0745T^2) - (3.8 + 0.01T)S + 0.698(5890 + 38T - 0.375T^2 + 3S)) \tag{4}$$

Os valores de salinidade e de temperatura são calculados com base num módulo independente da hidrodinâmica responsável pela evolução relativa a um referencial eulereano de todas as propriedades da água o qual resolve a equação (1) aplicada a um meio 3D.

A temperatura e a salinidade podem ser valores constantes ou evoluir no tempo devido ao efeito do transporte por parte do escoamento de descargas pontuais, de fluxos à superfície, de trocas de calor no caso da temperatura (radiação solar, radiação infravermelha, calor latente e sensível) e trocas de massa no caso da salinidade (evaporação/precipitação).

### 5.3 FECHO TURBULENTO

A resolução numérica das equações do módulo hidrodinâmico além de ser discreta no espaço também o é no tempo. Por este motivo, o módulo hidrodinâmico resolve na realidade as equações apresentadas anteriormente com base numa decomposição à Reynolds.

Esta decomposição pode ser perspectivada como uma filtragem temporal, em que os valores instantâneos das propriedades ( $f$ ) são substituídos por quantidades médias ( $\bar{f}$ ) mais flutuações turbulentas ( $f'$ ).

A integração temporal da equação (3) permite escrevê-la em termos de valores médios surgindo, devido aos efeitos não lineares, termos adicionais (tensores de Reynolds). Estes termos representam a contribuição do transporte turbulento para o campo médio e podem ser vistos como o transporte das flutuações do campo variável em estudo pelas flutuações do campo da velocidade.

Levanta-se assim um novo problema usualmente designado por “fecho da teoria da turbulência”. Existem diversos métodos de resolver este problema sendo comum admitir que este novo termo é proporcional ao gradiente da propriedade média transportada, ou seja:

$$\overline{v'v'} = \nu_T \frac{\partial \bar{v}}{\partial n} \quad (5)$$

A variável  $\nu_T$  é designada por viscosidade turbulenta. Nos casos em que o meio possa ser considerado isotrópico pode-se admitir que  $\nu_T$  é constante. Caso contrário é necessário calcular para cada uma das direcções um valor,  $\nu_T = (\nu_x, \nu_y, \nu_z)$ .

Na maioria dos casos admite-se  $\nu_x = \nu_y$ , uma vez que na horizontal os processos normalmente podem-se considerar homogéneos. A grande diferença reside nas escalas características das direcções horizontal e vertical. Nesta perspectiva, o coeficiente de viscosidade turbulenta pode ser dividido em viscosidade turbulenta horizontal e vertical,  $\nu_T = (\nu_H, \nu_H, \nu_V)$ .

Uma vez que se admitiu que o novo termo tem uma natureza matemática semelhante ao termo das forças viscosas, a sua ordem de grandeza é facilmente comparável. As escalas normalmente resolvidas pelos modelos hidrodinâmicos são da ordem dos metros, a que corresponde uma viscosidade turbulenta várias ordens de grandeza superiores à viscosidade molecular, pelo que as forças viscosas podem ser consideradas desprezáveis.

Na horizontal o sistema Mohid permite três opções de parametrização da viscosidade turbulenta nomeadamente: valor constante, Smagorinsky e bi-harmónico.

O fecho turbulento vertical é feito com base o módulo de turbulência do modelo GOTM (General Turbulence Ocean Model). Neste módulo podem-se encontrar um conjunto de diferentes modelos para a descrição das trocas turbulentas nas camadas de mistura. Todos os modelos usam o princípio de viscosidade turbulenta, que permite obter os coeficientes de troca turbulenta em função de propriedades do escoamento médio.

Entre os modelos introduzidos no GOTM, os fechos de segunda ordem de duas equações ( $k-\varepsilon$  e Mellor-Yamada) são os que descrevem mais realisticamente a turbulência nas camadas limite de superfície e fundo, com um detalhe que permite a sua utilização num modelo tridimensional sem um custo computacional elevado.



Os modelos k-ε e Mellor-Yamada mais evoluídos no modelo GOTM (e portanto no sistema MOHID) diferem da versão standard na escolha dos parâmetros nas equações de transporte que controlam a transição a condições de estratificação estável e na utilização de funções de estabilidade, numericamente estáveis, que consideram mais correlações no fecho da turbulência. Isto permite uma melhor descrição da camada de mistura para distintos escoamentos como tem sido demonstrado em diversas aplicações a distintos ambientes tanto em plataformas continentais como em estuários e em oceano aberto.

O modelo também incorpora parametrizações dos coeficientes turbulentos no interior do oceano, isto é, onde os processos de estratificação dominam sobre as tensões de corte criadas na superfície e no fundo. Para mais informação sobre as aplicações e os avanços teóricos no módulo de turbulência do modelo GOTM pode consultar-se a página web (<http://www.gotm.net>).

Os modelos de turbulência de duas equações no sistema MOHID (k-ε e Mellor-Yamada) calculam os coeficientes de troca turbulenta (para o momento  $v_t$  para o momento e  $v'_t$  para o calor) a partir da expressão:

$$\begin{aligned} v_t &= c_{\mu} \sqrt{k} L \\ v'_t &= c'_{\mu} \sqrt{k} L \end{aligned} \quad (6)$$

onde k representa a energia cinética turbulenta, L a escala de comprimento característica dos movimentos turbulentos e  $c_{\mu}$  e  $c'_{\mu}$ , as funções de estabilidade para o momento e os escalares, respectivamente.

A energia cinética turbulenta é calculada com base numa equação de transporte:

$$\partial_t k + \partial_z F(k) = P + B - \varepsilon \quad (7)$$

onde a evolução temporal da TKE é um balanço dum termo difusivo, um termo de produção pela tensão de corte do escoamento médio P, um termo B, que dá conta das trocas entre TKE e energia potencial e um termo dissipativo ε que é sempre um poço e representa a dissipação da TKE em energia térmica.

No modelo de Mellor-Yamada o comprimento característico da turbulência é calculado mediante uma equação de transporte da forma:

$$\partial_t (kL) + \partial_z F(kL) = L(c_{L1}P + c_{L3}B - (1 - E_2 \left(\frac{L}{L_z}\right)^2)\varepsilon) \quad (8)$$

e no modelo k-ε calcula a dissipação da TKE, que se relaciona com o comprimento turbulento pela expressão:

$$\varepsilon = (c_{\mu}^0)^3 \frac{k^{3/2}}{L} \quad (9)$$

A equação de transporte para a dissipação da TKE é da forma:

$$\partial_t \varepsilon + \partial_z F(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} P + c_{\varepsilon 3} B - c_{\varepsilon 2} \varepsilon) \quad (10)$$

Embora os modelos standard k- $\varepsilon$  e Mellor-Yamada possam ser utilizados no MOHID, a eleição do valor de  $c_{\varepsilon 3}$  e as funções de estabilidade para as quais se obtêm resultados mais realistas em distintas situações são diferentes das standard, permitindo uma melhoria sensível na descrição da dinâmica das camadas de mistura.

## 5.4 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

A maior parte dos modelos hidrodinâmicos utilizam na discretização espacial das equações o método das diferenças finitas ou o método dos elementos finitos. Um método menos divulgado é o dos volumes finitos. Neste caso o ponto de partida é as equações aplicadas a volumes de controlo tal como foram apresentadas anteriormente. Desta forma a malha é definida explicitamente e as equações são resolvidas sempre da mesma forma independentemente da geometria das células. Uma vez que as equações são sempre resolvidas na forma de uma divergência de um fluxo, este método garante a conservação das propriedades transportadas (Ferziger e Perić, 1995 e Vinokur, 1989).

Apesar de, no módulo hidrodinâmico aqui apresentado, se ter optado por volumes finitos com uma malha estruturada por uma questão de simplicidade de discretização e eficiência de cálculo, esta metodologia pode ser aplicada facilmente a malhas não estruturadas. Esta metodologia foi utilizada por Chippada et al. (1998) para simular processos costeiros tendo utilizado uma malha não estruturada de volumes de controlo na forma de triângulos.

### 5.4.1 Discretização Vertical

Tal como na horizontal, na discretização vertical é comum a utilização de transformação de coordenadas para otimizar a precisão da malha. Na vertical este problema é ainda mais importante porque os gradientes são normalmente muito superiores. Uma discretização grosseira na vertical pode dar origem a excesso de difusão numérica e pode tornar impraticável, por exemplo, a simulação do efeito da estratificação sobre um escoamento.

Uma das principais características dos modelos oceânicos e costeiros de diferenças finitas é a abordagem que adoptam para a discretização vertical. As discretizações mais conhecidas são: a sigma, a isopícnica e a cartesiana. A partir desta característica é possível antever que, por exemplo, um modelo sigma (ex: POM, SCRUM) é uma boa ferramenta para o estudo de meios bem misturados que sigam a topografia do fundo, mas já não são em meios estratificados com fortes gradientes de topografia.

Um modelo de coordenadas isopínicas pode ser uma boa solução para simular meios estratificados onde o escoamento seja forçado pela densidade. Neste tipo de discretização as camadas da malha coincidem com linhas de iso-densidade tendo por objectivo de minimizar a difusão numérica entre camadas, partindo do pressuposto que o escoamento se faz preferencialmente ao longo destas linha e que a estratificação vertical inibe trocas significativas entre camadas. Em regiões influenciadas pelo fundo, pela inércia ou em presença de escoamentos secundários o campo de velocidades possui uma componente importante na direcção perpendicular às isopínicas (linhas de igual densidade), contrariando os pressupostos deste modelo.

Por fim a malha cartesiana pode ser uma boa solução nos casos em que as duas discretizações anteriores falham, como seja por exemplo o escoamento ao longo do talude da plataforma continental (Neves et al., 2000). Neste caso a influência da topografia é caracterizada por fortes gradientes e o escoamento não segue as isopícnicas.

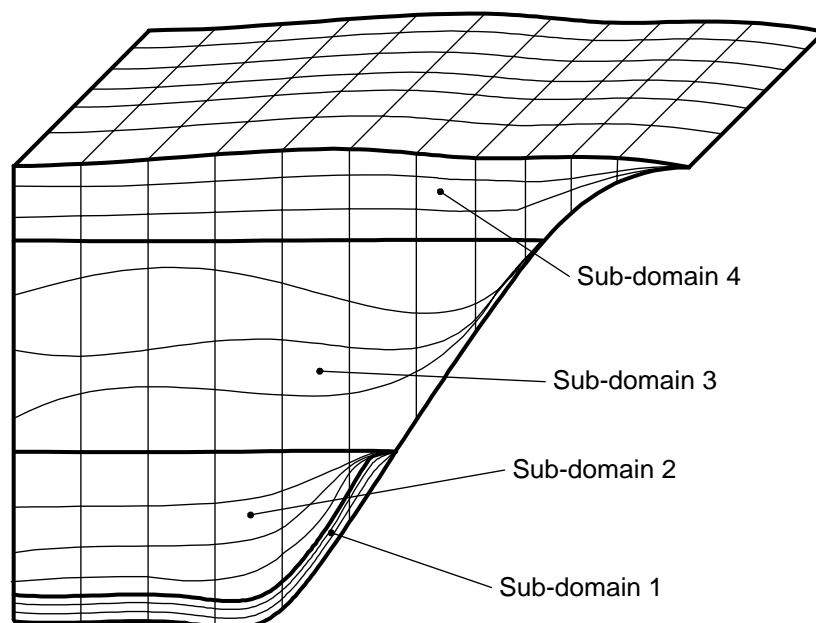
Tendo em consideração a variabilidade de comportamentos que é possível encontrar na natureza, pode-se dizer que na maioria das aplicações não existe uma discretização que seja a que melhor se adapte à simulação de todo o domínio, verificando-se que, por vezes, a melhor solução seria discretizar de forma diferente vários sectores do domínio.

Os modelos dupla-sigma (Deleersnijder e Beckers, 1992 e Santos, 1995) constituem uma tentativa de resposta para este tipo de problemas. Neste caso a coluna de água é dividida em dois domínios sigma: um do fundo até uma profundidade constante, normalmente a base da camada de mistura, e outro, por cima, onde é aplicada uma segunda discretização sigma, que só acompanha o fundo nas pequenas profundidades, evitando assim uma malha muito distorcida, em especial, nas zonas profundas (> 1000 m). Ao evitar esta distorção o modelo minimiza a mistura vertical associada à difusão numérica horizontal.

Este tipo de modelos que combinam diferentes discretizações, apesar de poderem representar uma solução para alguns problemas, continuam no entanto a apresentar pouca flexibilidade.

A solução mais eficiente será então recorrer a um modelo que não dependa de um tipo limitado de discretizações e que permita ao utilizador criar novas discretizações sem muito esforço.

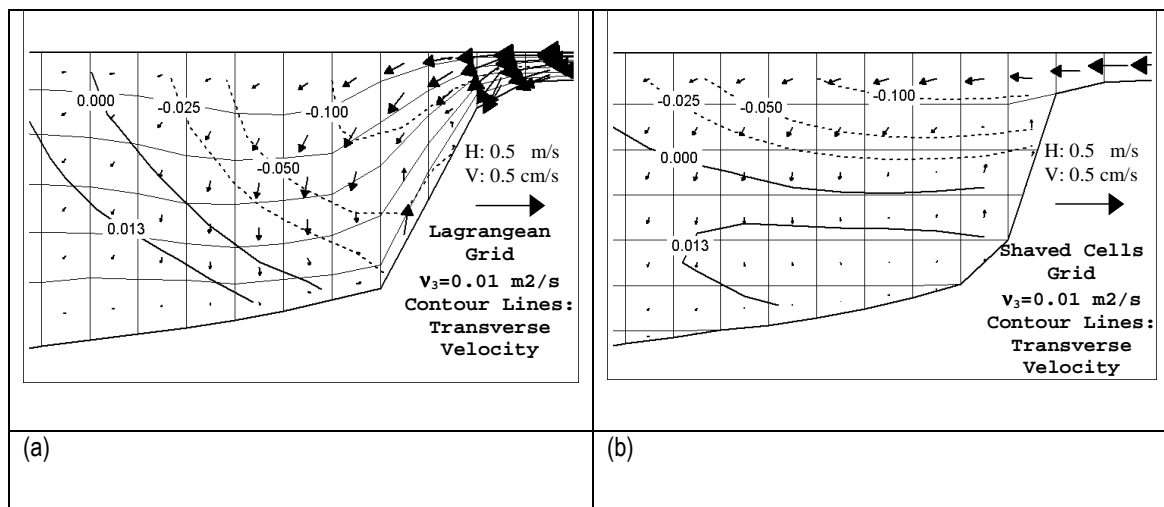
Os modelos de volumes finitos permitem uma grande flexibilidade, ao nível da discretização espacial, uma vez que a geometria é introduzida numa forma explícita através das áreas e volumes de cada célula. Esta versatilidade permite subdividir o domínio tanto na horizontal como na vertical, em zonas com diferentes discretizações (cf. *Figura 3*).



*Figura 3 – Malha ilustrativa das potencialidades de discretização vertical do sistema Mohid.*

Esta metodologia possibilita igualmente o desenvolvimento, sem muito esforço, de coordenadas verticais alternativas que melhor se adaptem a um caso particular. Este é o caso da coordenada Lagrangeana que foi desenvolvida para minimizar as trocas entre camadas (*Figura 4*), sendo possível assim reduzir ao mínimo a difusão numérica associada ao transporte horizontal (Neves et al., 2000).

As coordenadas cartesianas tradicionais consideram cada camada com uma espessura constante ao longo de todo o domínio. Esta regra rígida levanta problemas na discretização do fundo. Uma solução alternativa é a utilização do conceito de células cortadas (*shaved cells*), que consiste em garantir que, junto ao fundo, a espessura da camada é igual à profundidade menos o nível da face mais próxima do fundo (*Figura 4b*). Este tipo de metodologia é extremamente simples de implementar em modelos de volumes finitos (Adcroft e Marshall, 1997, Martins et al., 2000).



*Figura 4 – Cortes verticais mostrando escoamentos secundários num talude. A figura a) apresenta resultados obtidos com uma malha Lagrangeana que foi inicializada com uma configuração de malha sigma enquanto a figura b) representa o mesmo escoamento com uma malha cartesiana com células cortadas junto ao fundo.*

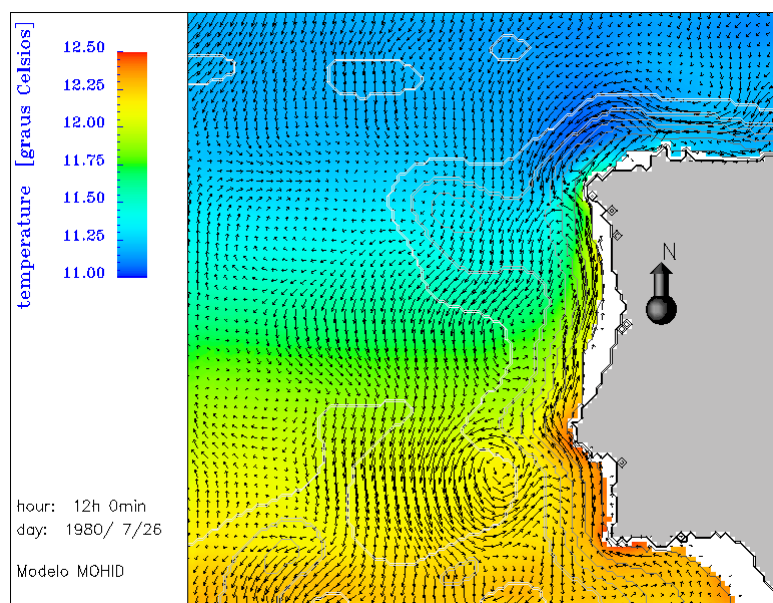
Tendo por objectivo a resolução de problemas específicos, e tirando partido da flexibilidade do sistema Mohid neste aspecto, foram implementadas no sistema outras discretizações inovadoras, como seja o caso da discretização designada de “Harmónica”, a qual foi implementada para permitir correr o sistema Mohid em Albufeiras. Nestes casos verificam-se situações em que a superfície livre, num ano seco, pode variar mais 30 m.

Tendo em conta estas oscilações extremas foi desenvolvida uma coordenada que é inicializada como se fosse cartesiana e quando o nível da albufeira começa a descer a espessura da camada diminui à mesma velocidade até atingir uma espessura mínima quando essa é atingida, o processo repete-se para a camada logo abaixo e assim sucessivamente. Quando o nível da albufeira sobe as camadas que são expandidas pela ordem inversa com que foram contraídas. Esta nova coordenada, permite de uma forma eficiente, manter a estratificação da albufeira evitando todos os problemas de difusão numérica associados à coordenada sigma (Braunschweig, 2001).

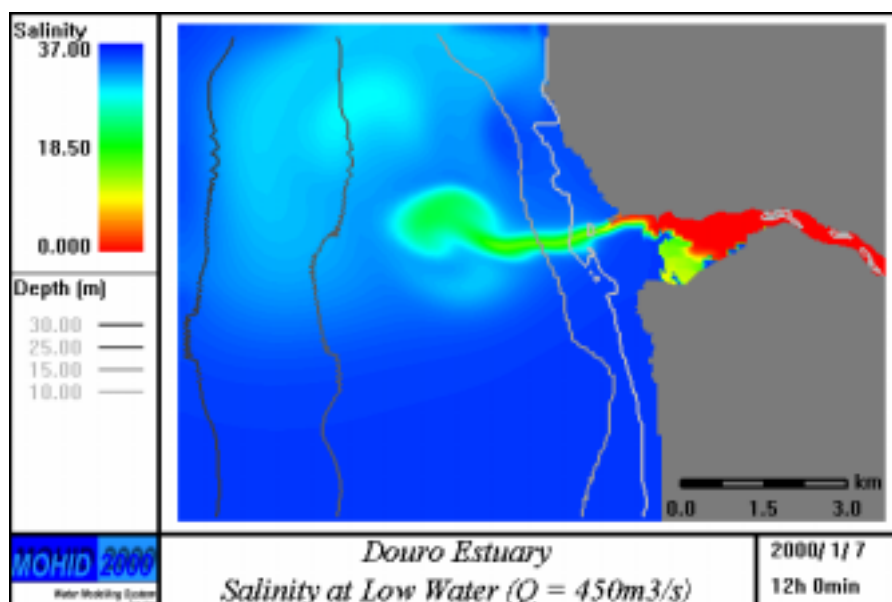
Outro exemplo inovador é uma coordenada que melhora a parametrização do atrito no fundo, a que se chamou de “espessura fixa”. Neste caso, admite-se que camadas de espessura constante acompanham o fundo. Este tipo de coordenada é, utilizada junto ao fundo e complementada por outro tipo de discretização vertical até à superfície livre. Esta

coordena permite que a distância à parede (fundo) das velocidades calculadas mais perto do fundo seja sempre constante tornando o cálculo do atrito mais consistente e preciso.

A flexibilidade do sistema Mohid ao nível da discretização vertical permite a respectiva utilização tanto em ambientes oceânicos (cf. *Figura 5*), como escoamentos estuarinos (cf. *Figura 6*), em circulação em albufeiras (cf. *Figura 7*) ou até processos de pequena escala como seja a dispersão de plumas térmicas (cf. *Figura 8*).



*Figura 5 – Campo de correntes no Atlântico. Resultados produzidas no âmbito do projecto científico europeu OMEX (Coelho et al., in press).*



*Figura 6 – Campo de salinidades no estuário do Douro para uma situação de caudal médio e baixa mar.*

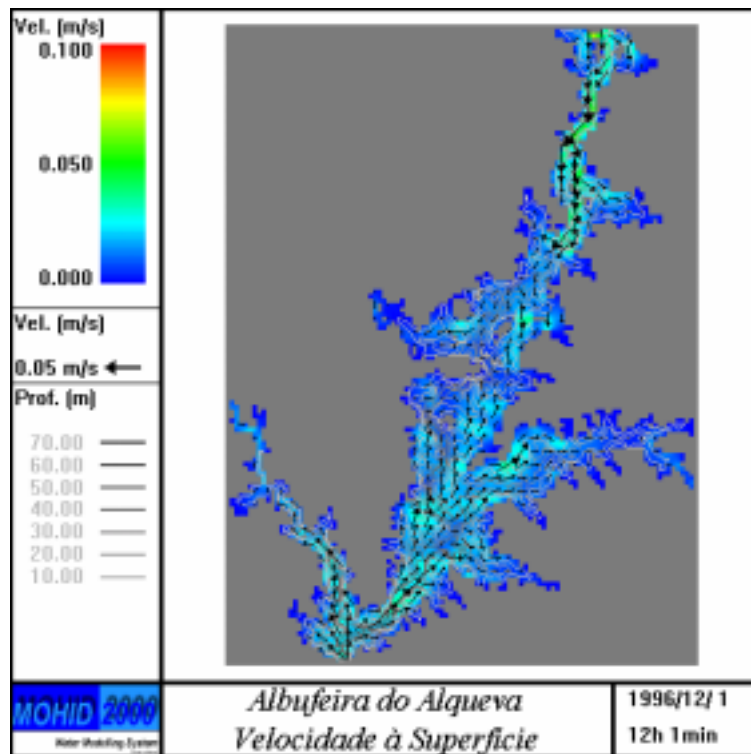


Figura 7 – Escoamento na futura Albufeira do Alqueva. Quando a barragem desta albufeira estiver construída o Alqueva será o maior lago artificial da Europa.

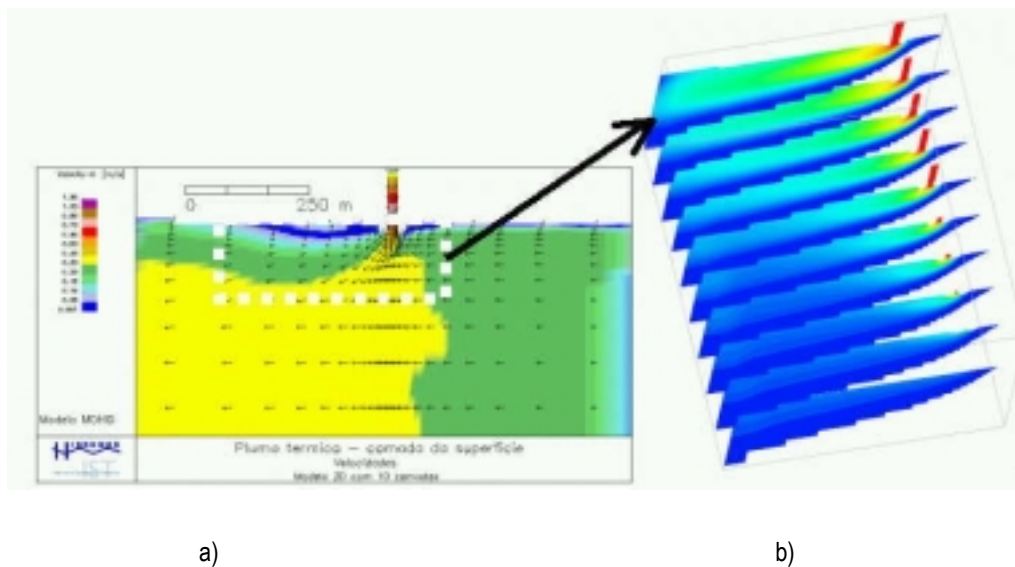


Figura 8 – Simulação da dispersão da pluma térmica duma central termoelétrica situada perto de Lisboa. a) Campo de velocidades à superfície b) campo vertical de temperatura.

### 5.4.2 Discretização Horizontal

A resolução horizontal do sistema Mohid é variável em sua extensão, permitindo a simulação mais detalhada das correntes nas zonas dos terminais e conseqüentemente das trajetórias das manchas de óleo (cf. Figura 9).

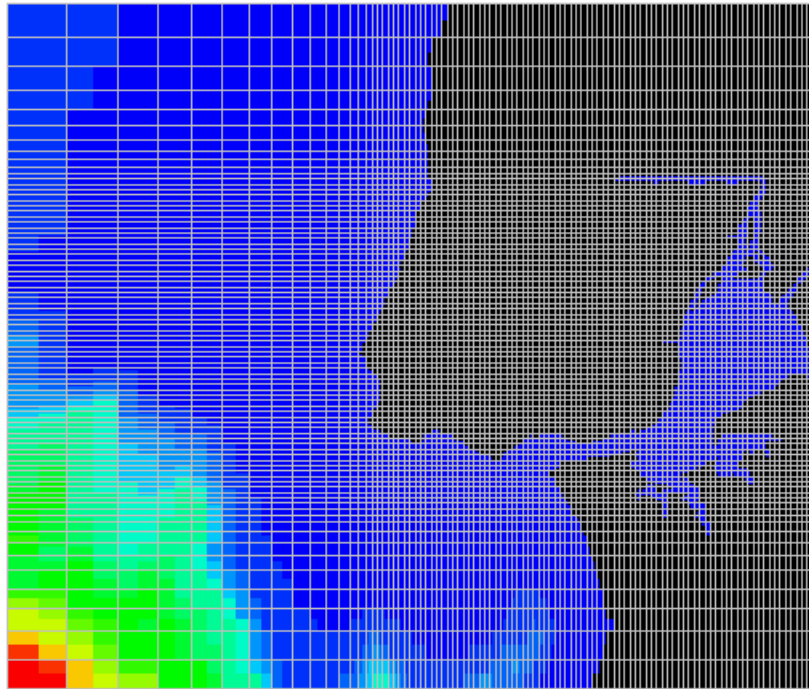


Figura 9- Exemplo de aplicação de passo variável ao estuário do Tejo (Portugal).

O modelo utiliza uma malha que na classificação proposta por Arakawa e Lamb (1977) corresponde à malha C (cf. Figura 10). Este tipo de abordagem evita médias no cálculo dos gradientes de pressão (barotrópica e baroclínica) e da divergência de fluxos (continuidade: nível e traçadores).

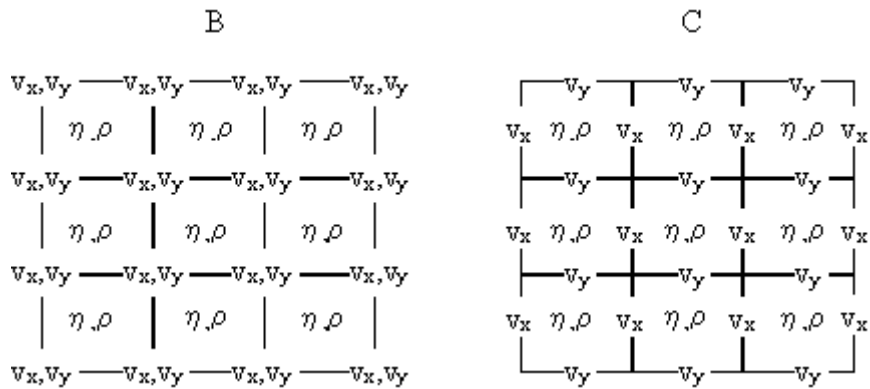


Figura 10 – Classificação de malhas 2D descentradas segundo Arakawa e Lamb (1977).

A distribuição dos pontos de cálculo adoptada para o cálculo das propriedades do escoamento ( $\eta$ ,  $v_x$ ,  $v_y$ ,  $v_z$ ), minimiza o número de interpolações, atribuindo maior importância ao cálculo dos gradientes de pressão (barotrópica e baroclínica) e de divergência de fluxos (continuidade: nível e traçadores). Implica no entanto a execução de médias para calcular o termo de Coriolis. Em qualquer dos casos, a precisão da solução só está comprometida quando o passo da malha não permite

resolver o raio de deformação interno de Rossby (~40 km a 30° de latitude). Esta escala espacial corresponde à distância horizontal ao longo da qual um fluido estratificado em rotação é afectado quando perturbado. (11)

$$a = \frac{c}{f} \wedge c = \frac{\Delta\rho}{\rho_0} \sqrt{gH} \quad (11)$$

sendo  $c$  é a celeridade da perturbação num meio estratificado.

Usualmente os modelos globais utilizam uma malha do tipo B, uma vez que, mesmo recorrendo a super-computadores a precisão destes modelos não é suficiente para resolver o raio de deformação interno de Rossby. Existem já modelos que têm uma precisão de 0.2° graus (Kantha and Clayson, 2000) antevendo, que num futuro próximo, mesmo os modelos globais tenderão a utilizar malhas do tipo C. Este tipo de malha é também a ideal para acoplar o modelos hidrodinâmicos a modelos de propriedades da água uma vez que não é necessário recorrer a interpolações para calcular a divergência de fluxos.

## 5.5 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

Os termos que condicionam a estabilidade das equações são a pressão barotrópica (ondas gravíticas), o atrito no fundo e a difusão vertical. Ao primeiro está associada uma celeridade elevada,  $\sqrt{gh}$ , sendo  $h$  a profundidade e  $g$  a aceleração gravítica. A discretização do atrito levanta alguns problemas quando o gradiente de velocidade junto ao fundo é muito intenso. Por fim a difusão vertical introduz maiores dificuldades quando a discretização vertical é muito fina.

Como o objectivo de não impor limites muito restritivos aos critérios de estabilidade foi adoptada uma discretização semi-implícita do tipo ADI "*Alternante Direction Implicit*". Os três termos que apresentam mais problemas de estabilidade foram discretizados implicitamente, enquanto que para os restantes optou-se por uma abordagem explícita. A vantagem de um método semi-implícito sobre um totalmente implícito é o sistema de equações resultante poder ser do tipo tridiagonal. Estes sistemas são resolvidos de uma forma muito eficiente pelo algoritmo de Thomas. Os métodos implícitos, quando aplicados a domínios 2D e 3D, dão origem a sistemas de equações esparsos, sendo por isso, necessário recorrer a métodos dispendiosos em termos de rapidez de cálculo.

O modelo prevê ainda a possibilidade de utilização, em alternativa, de dois tipos de discretizações semi-implícitas: uma que necessita da resolução de 6 equações em cada passo temporal (*cf. Figura 11*) conhecido pelo esquema de Leendertse (Leendertse, 1967) e outra baseada no esquema S21 (Abbott et al., 1973) que envolve a resolução de 4 equações (*cf. Figura 12*).

Em ambos os métodos o esquema ADI é aplicado à equação da continuidade (2D-horizontal) para calcular a elevação da superfície livre. Basicamente, substituiu-se alternadamente todo (Leendertse) ou parte (S21) do integral da velocidade numa direcção, por uma equação de conservação de quantidade de movimento, enquanto na direcção perpendicular mantêm-se a velocidade explícita.



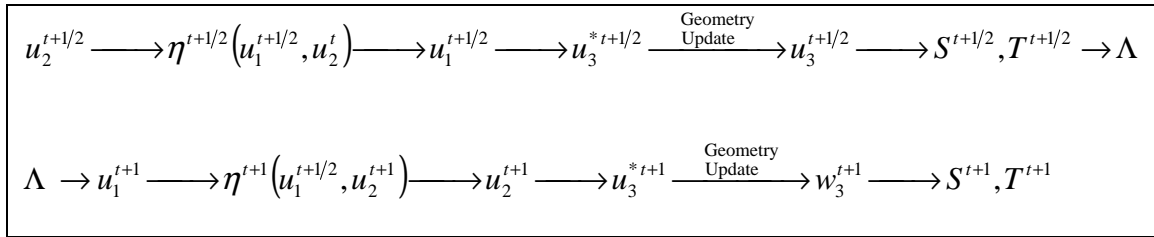


Figura 11 – Discretização temporal do método de 6 equações proposto por Leendertse, 1967.

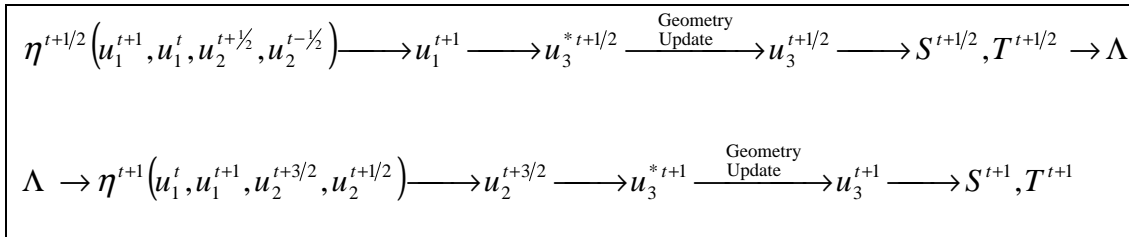


Figura 12 – Discretização temporal do método S21 proposto por Abbott et al., 1973.

## 5.6 CONDIÇÕES DE FRONTEIRA

O modelo permite a consideração de condições de fronteira abertas e fechadas. As primeiras são usualmente utilizadas para definir a interacção do módulo hidrodinâmico com outras massas de água, enquanto as segundas são utilizadas para definir a linha de costa e os processos de cobertura e descobertura em zonas intertidais.

As condições de fronteira aberta podem ser divididas em dois tipos: passivas e activas. Estas últimas são conhecidas à priori, isto é, são impostas e não calculadas pelo modelo. Um exemplo deste tipo de fronteira é a imposição de uma curva de maré para simular a hidrodinâmica de um estuário ou a imposição da vazão de um rio para simular uma cunha salina. As condições de fronteira passivas dependem da solução interna e têm como principal objectivo deixar sair perturbações geradas dentro do domínio. As fronteiras radiativas são um exemplo deste tipo de condição de fronteira, sendo utilizadas em diversos tipos de aplicação: ondas de vento, escoamentos oceânicos e costeiros.

As fronteiras fechadas podem-se dividir em fixas e móveis. As primeiras são utilizadas para definir a linha de Costa, enquanto as segundas são extremamente úteis para definir processos de cobertura e descobertura em zonas intertidais. Tanto ao nível de fluxo de massa como de quantidade de movimento optou-se, por defeito, por impor fluxo nulo ao longo destas fronteiras fechadas.

### 5.6.1 Fronteiras abertas

Desde o início do desenvolvimento do sistema Mohid, em 1985, as condições de fronteira aberta foram eleitas como um dos principais temas de investigação. Este é um tema complexo e exige um acompanhamento constante do estado da arte e investigação das várias soluções.

Diversas teses de doutoramento e mestrado (Aires, 1995, Silva, 1991, Villarreal 2001) têm sido e encontram-se ainda a ser desenvolvidas no seio da equipe responsável pelo desenvolvimento e manutenção do sistema Mohid, das quais resultaram

a publicação de diversos artigos científicos que abordam esta temática (Neves e Silva, 1991, Aires e Neves, 1991, Villarreal et al., *in press*, Coelho et al., *in press*).

Ao longo do tempo tem sido efectuada uma actualização constante das diferentes metodologias propostas na bibliografia que provaram ser robustas em casos reais. A experiência acumulada tem mostrado que não existe uma solução universal e que, em cada caso, é necessário testar diferentes soluções, optando pela que menos perturbe a solução e simultaneamente não deixe o modelo divergir.

A metodologia para definir condições de fronteira abertas é extremamente versátil. Uma forma que o utilizador tem de garantir que a simulação não tende a divergir da solução conhecida, é definindo uma solução exterior (ou de referência) e fornecê-la ao módulo hidrodinâmico na entrada de dados. Esta solução exterior pode ser definida de uma forma contínua para cada ponto de cálculo recorrendo a campos de propriedades definidos em arquivos ASCII, que podem ser constantes ou variáveis no tempo.

Outra hipótese é definir a solução em alguns pontos, e o módulo hidrodinâmico durante o *Run* interpolar a solução para os pontos fronteira. Esta é a metodologia utilizada na imposição da maré. Esta abordagem tem a vantagem de minimizar a entrada de dados. A informação pode ser dada na forma duma série temporal ou na forma de componentes harmónicas no caso da maré.

A solução exterior pode ser definida com base em medidas feitas especificamente para o trabalho de modelagem ou a partir de base de dados construídas por organismos especializados em recolha e processamento de medidas. Caso não existam fontes locais de medidas de salinidade, de temperatura, de ventos e maré, as fontes alternativas usualmente utilizadas pelo grupo de utilizadores do Mohid são bases de dados disponíveis na internet que disponibilizam informação para todo o mundo como é o caso da NOAA (Levitus e Boyer, 1994 e Levitus *et al.*, 1994) cujos dados climatológicos de salinidade e temperatura são extremamente úteis, porque permitem determinar um campo de velocidades e níveis, admitindo que a hipótese geostrófica é válida.

A metodologia normalmente utilizada para se obter este escoamento consiste em considerar uma profundidade de movimento nulo (Paillet e Mercier, 1997, Arhan et al, 1994).

Com base na equação do vento térmico (12) e admitindo que a velocidade a uma determinada profundidade é nula é possível obter o perfil de velocidade acima dessa mesma profundidade.

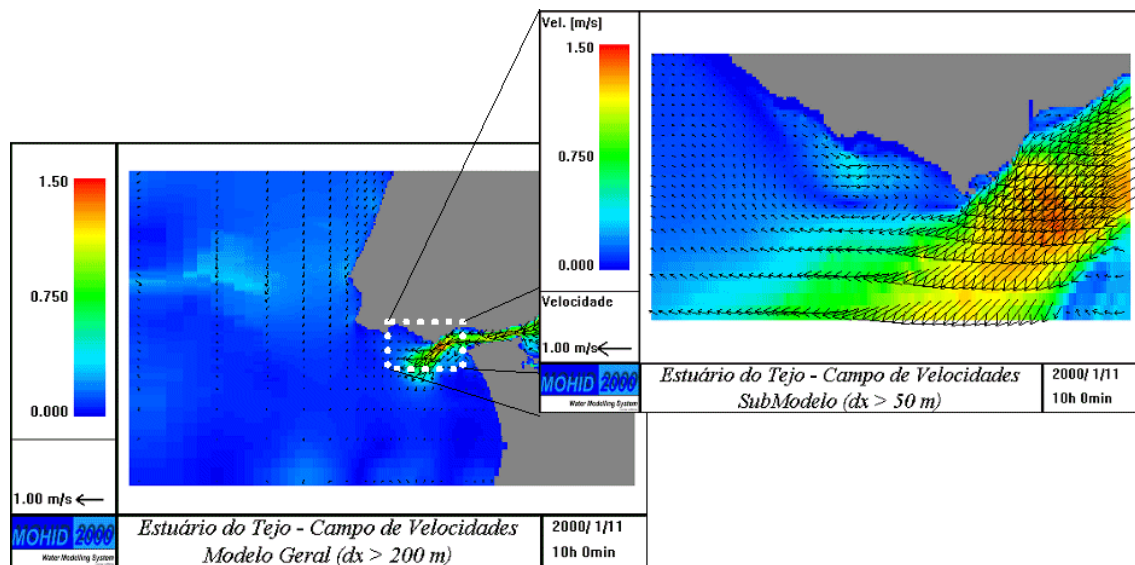
$$-f \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial y} \wedge f \frac{\partial v}{\partial z} = \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad (12)$$

Sabendo que a velocidade barotrópica é a média do perfil de velocidades é possível obter o gradiente da superfície da relação geostrófica integrada na vertical. Os dados de ventos podem ser utilizados não só como forçamento interno mas também para definir a solução exterior, a partir da deriva de Ekman ou da solução de Severdrup. Uma fonte de ventos para qualquer ponto do globo podem ser os modelos atmosféricos globais, como é o caso do modelo do ECMWF (European Center for Medium-Range Weather Forecasts - Trenberth *et al.*, 1990). Como solução de recurso podem ser utilizados os ventos climatológicos propostos por Hellerman e Rosenstein (1983).

No caso da maré podem ser utilizados os resultados do modelo global de maré FES95.2 (Le Provost et al., 1998). Este modelo não é mais que um modelo hidrodinâmico de elementos finitos FES94.1 (Le Provost et al., 1994) ao qual foi adicionado um módulo de assimilação de dados. A assimilação de dados é efectuada a partir da solução obtida do modelo empírico CSR2.0 da universidade de Texas para os oceanos Atlântico, Índico e Pacífico. A principal razão apontada para os erros do modelo puramente hidrodinâmico FES94.1 são o desconhecimento da batimetria em muitas zonas do Globo.

Os resultados do modelo FES95.2 disponíveis na internet (<ftp://spike.cst.cnes.fr/pub/techine/tide/fes95.2.1>) têm uma precisão de 0.5°x0.5° graus. Estes resultados referem-se a 26 componentes de maré para todo o mundo. As 8 principais componentes de maré são calculadas directamente pelo modelo hidrodinâmico: K1, O1, Q1, M2, S2, N2, K2 e 2N2 em que somente as duas últimas não são corrigidas por assimilação de dados. As outras 18 componentes de maré são obtidas a partir das oito principais. A qualidade dos resultados do modelo foi aferida por comparação com a informação medida em 95 estações espalhadas por todo o mundo.

Em alternativa, também é possível utilizar o próprio módulo hidrodinâmico para calcular a solução de referência recorrendo ao conceito de modelos encaixados (cf. *Figura 13*). Uma vez que toda a programação do sistema Mohid está orientada por objectos, o número de modelos encaixados que o utilizador pode definir é ilimitado. Na realidade, esta escolha está limitada à capacidade de cálculo disponível.



*Figura 13 – Modelos encaixados aplicados ao estuário do Tejo. Estudo efectuado no âmbito do plano de monitorização da qualidade da água das praias da costa do Estoril.*

Esta metodologia é extremamente poderosa, podendo ser utilizada um de dois métodos para definir a solução exterior. Um dos caminhos possíveis a seguir é definir um modelo de larga escala com um passo espacial grosseiro, onde seja relativamente fácil definir as condições de fronteira, e de seguida ir implementando modelos encaixados que, na zona de estudo, tendam a reduzir o passo da malha até se obter a precisão desejada. Esta metodologia tem como desvantagem a exigência em termos de capacidade de cálculo. O outro caminho consiste em recorrer a modelos encaixados para obter uma solução exterior que não é mais do que uma simplificação das equações primitivas. Neste caso, pode-se correr em paralelo um modelo que resolva as equações primitivas e um outro que resolva, para o mesmo domínio as equações simplificadas propostas por Roed e Smedstad (1984), que não necessitam de condições fronteira, uma vez que desprezam

todos os termos não lineares e os gradientes perpendiculares à fronteira. O sistema Mohid permite ao utilizador na entrada de dados anular termos das equações e assim resolver estas numa forma simplificada.

O cálculo do escoamento nas fronteiras por parte do módulo hidrodinâmico está dividido em duas etapas. Numa primeira etapa as equações primitivas são resolvidas. Neste caso a fronteira pode ser resolvida impondo a solução exterior, anteriormente referida, ou resolvendo uma equação que permite com base nas condições internas do módulo hidrodinâmico extrapolar o valor na fronteira (radiação) ou um misto das duas.

As propriedades que necessitam de condições de fronteira no módulo hidrodinâmico são, nomeadamente: os níveis, as velocidades e os traçadores (ex: temperatura e salinidade). Os níveis podem ser impostos (condição de fronteira activa) ou então, caso se opte por uma condição de radiação, existem duas possibilidades:

- Condição de fronteira de Blumberg e Kantha (1985)

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \sqrt{gh} \left( \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \cdot \vec{n} = \frac{1}{T_d} (\eta_{ext} - \eta)$$

- Condição de fronteira de Flather (1976)

$$\vec{v} - \vec{v}_{ext} = \sqrt{gh} (\eta - \eta_{ext}) \cdot \vec{n}$$

$\vec{n}$  – vector normal à fronteira

$T_d$  – tempo de decaimento

$\eta_{ext}, v_{ext}$  – nível e velocidade da solução exterior

$\eta, v$  – nível e velocidade a calcular

A primeira opção tem a particularidade de ser calculada no ponto de fronteira dos níveis e, a segunda, no primeiro ponto de cálculo das velocidades. Ambas as soluções podem ser totalmente radiativas, desde que o tempo de decaimento na primeira seja infinito ou os valores exteriores no segundo caso sejam nulos, caso contrário são uma solução híbrida entre uma condição de fronteira activa e passiva.

A condição de fronteira das velocidades não é tão importante no balanço de forças, uma vez que só influencia os termos difusivo, advectivo e de Coriolis, que são termos de inércia, mas pode ser relevante em termos de estabilidade. Neste caso nos pontos fronteira é resolvida uma equação simples de radiação (Palma e Matano, 1998 e Palma e Matano, 2000):

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + c \cdot (\nabla \vec{v}) \cdot \vec{n} = 0$$

sendo  $c$  a celeridade a que se propagam as perturbações.

Se  $c = 0$  esta condição torna-se numa condição de valor imposto. Se  $c = +\infty$  então estamos perante uma condição de gradiente nulo.

O valor real de  $c$  é difícil de determinar porque as perturbações na componente barotrópica da velocidade propagam-se a  $\sqrt{gh}$  enquanto as da componente baroclínica propagam-se a uma velocidade 2 ordens de grandeza inferior (velocidade de propagação das ondas internas), usualmente assumido como sendo  $\sqrt{gh \cdot 10^{-3}}$  mas ao qual está associada uma grande incerteza. A solução é dividir na fronteira as velocidades em duas componentes aplicar a equação anterior a cada uma delas e voltar a somá-las.

Para o caso dos traçadores é resolvida uma equação de advecção que pode ou não ser corrigida com uma velocidade radiativa (Stevens 1991). Esta equação é semelhante à proposta por Blumberg e Kantha (1985) para os níveis:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + (\vec{v} + c \cdot \vec{n}) \nabla P = \frac{1}{T_d} (P_{ext} - P)$$

Neste caso o valor de  $c$  é igual ao da componente baroclínica das velocidades, na medida em que ambos sofrem a influência da propagação de ondas internas.

A segunda etapa do cálculo dos valores na fronteira, pode ou não ser accionada pelo utilizador e consiste em, após a resolução das equações, relaxar qualquer ponto de cálculo para a solução exterior com o objectivo de não deixar a solução simulada divergir devido a pequenas inconsistências entre a solução de referência e as equações do módulo hidrodinâmico (13). Neste caso é resolvida a seguinte equação:

$$P^{t+\Delta t} = P^* (1 - \alpha) + P^{ext} \cdot \alpha \quad (13)$$

Neste caso  $P$  é uma propriedade genérica que pode ser o nível, uma velocidade ou um traçador,  $P^*$  é a propriedade calculada recorrendo às equações primitivas enquanto  $P^{ext}$  é o valor da propriedade da solução exterior e  $\alpha$  o seu peso relativo. A condição de fronteira FRS (*Flow Relaxation Scheme*) proposta por Martinsen e Engedahl (1987) não é mais que aplicar esta metodologia numa faixa de dez células ao longo da fronteira admitindo que o coeficiente  $\alpha$  tem o valor de um na fronteira e tende para zero conforme se afaste desta.

## 5.6.2 Fronteiras fechadas

Fisicamente existem trocas de quantidade de movimento entre a costa e o escoamento por atrito lateral. Todavia este processo é desprezável relativamente ao atrito no fundo, devido à diferença existente entre o passo espacial na horizontal e na vertical. O seu efeito do atrito lateral sobre o escoamento só será visível no escoamento para passos de malha inferior a 10 m. Nestes casos o utilizador tem que escolher a opção de não escorregamento lateral.

Como foi anteriormente referido, a fronteira móvel é uma fronteira fechada cuja posição evolui no tempo. Este tipo de fronteira é utilizado para simular zonas intertidais. Neste caso é necessário fazer uma verificação constante de todos os pontos de cálculo de velocidades que estão descobertos onde é imposta a condição de fluxo de massa e fluxo de

quantidade de movimento nulos. Um ponto de cálculo das velocidades considera-se descoberto se uma das seguintes condições ocorrer:

$$H_{ij} < HMIN \quad \text{e} \quad \eta_{ij-1} < -h_{ij} + HMIN$$

$$H_{ij-1} < HMIN \quad \text{e} \quad \eta_{ij} < -h_{ij-1} + HMIN$$

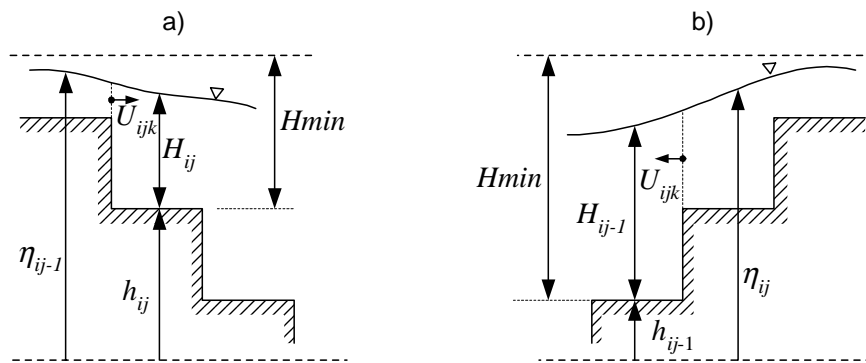


Figura 14- Condições para um ponto de cálculo de velocidades se considerar descoberto.

$HMIN$  é a altura de coluna de água mínima, abaixo do qual se considera que um ponto de cálculo de níveis já não tem água. Este valor tem que ser suficientemente grande de modo a minimizar a criação artificial de massa mas, por outro lado, se for demasiado grande pode introduzir erros na propagação da maré nas zonas intertidais.

O ruído provocado pelas variações bruscas de velocidade nas fases de cobertura ou descobertura deve ser controlado através de uma escolha criteriosa de  $HMIN$  (Leendertse, 1970, Stelling, 1983). O valor normalmente utilizado é na ordem dos 4 cm. As outras variáveis são  $H_{ij}$  profundidade total (ou altura da coluna de água),  $h_{ij}$  profundidade (ou cota a que se encontra o fundo) e  $\eta_{ij}$  nível (ou cota a que se encontra a superfície livre utilizando um referencial simétrico ao das profundidades).

## 6 Módulo de Transporte Lagrangeano

Os primeiros modelos de transporte lagrangeanos de que se podem encontrar referências na bibliografia utilizavam o conceito de traçador única e exclusivamente para seguir a respectiva trajectória e, deste modo, perceber de uma forma intuitiva os mecanismos de transporte.

Nestes modelos as propriedades básicas de cada traçador eram apenas a origem e a posição espacial. Posteriormente surgiram versões mais sofisticadas, que tinham como principal objectivo o estudo do impacte em ecossistemas aquáticos de emissões pontuais antropogénicas. Nestes modelos já aparecem associadas aos traçadores novas características que incluem propriedades indicadoras da qualidade da água (ex: coliformes, petróleo, temperatura e fitoplâncton), geometria, velocidade de sedimentação e propriedades turbulentas do escoamento.

No início dos anos 80 esta nova geração de modelos lagrangeanos tornou-se numa ferramenta comum de gestão ambiental. Nesta fase eram utilizados, principalmente, para estudar a dispersão de plumas térmicas de usinas termo eléctricas e plumas de emissários (Bork e Maier-Reimer, 1978, Chin, 1985, Monteiro *et. al*, 1992, Monteiro e Neves, 1992, Neves e Martins, 1996). Estes casos são caracterizados por gradientes acentuados e pelas plumas terem, usualmente, uma dimensão muito inferior à área que é simulada. Neste tipo de aplicações, a aproximação lagrangeana constitui uma boa solução, pois permite manter gradientes elevados uma vez que esta metodologia não possui os problemas de difusão numérica que caracteriza os modelos eulereanos.

O aumento exponencial da capacidade de cálculo dos computadores que se tem verificado nos últimos anos veio permitir que os modelos de traçadores lagrangeanos venham a ser utilizados para simular processos cada vez mais complexos, nomeadamente: o transporte de sedimentos Kelsey *et. al*, (1994), a dispersão de petróleo Shiau (1991), Mansur e Price (1992), produção primária Woods and Onken (1982), Dippner (1993), Rodrigues *et. al*(1996), Rodrigues and Neves, (1996)

O modelo lagrangeano tridimensional, aqui apresentado, foi inicialmente desenvolvido para ser acoplado à primeira versão do modelo hidrodinâmico Mohid (Neves, 1985) que era um modelo bidimensional. Numa segunda fase foram sendo adicionadas novas potencialidades permitindo a simulação de processos tais como descargas de águas residuais, emissão pontual de sedimentos (ex: rios e material dragado), trajectórias de manchas de petróleo e cálculo de tempos de residência.

Numa terceira fase o modelo foi generalizado para ser facilmente acoplado tanto a modelos 2D como 3D (Leitão, 1997). Neste modelo, os traçadores (ou partículas) possuem seis características principais: coordenadas espaciais (x, y, z), velocidade horizontal/vertical, tempo durante o qual o traçador mantém a velocidade, velocidade de sedimentação, massa e volume. Para cada uma destas propriedades é resolvida uma equação de evolução. A massa pode ser um *array* de mais de 30 propriedades (ex: nutrientes, fitoplancton, matéria em suspensão).

Neste capítulo só serão explicados os processos envolvidos no cálculo de trajectórias de manchas de petróleo.

### 6.1 DESLOCAMENTO DOS TRAÇADORES

As coordenadas espaciais são calculadas a partir da definição de velocidade:

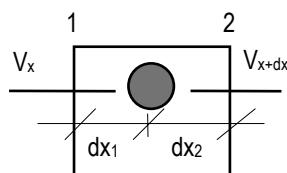
$$\frac{dx_i}{dt} = U_i(x_i, t)$$

A qual é resolvida com base num um método explícito simples:

$$x_i^{t+\Delta t} = x_i^t + \Delta t \cdot u_i'$$

A aplicação de métodos de ordem mais elevada, implica a utilização de procedimentos iterativos. O método de *Heun* utilizado por Monteiro (1995) corresponde a um esquema de previsão-correcção de dois níveis temporais, com um grau de precisão de 2ª ordem no tempo. Costa (1991) concluiu que a adopção de esquemas de ordem mais elevada só é necessária quando as linhas de corrente apresentam uma curvatura acentuada e o passo temporal é elevado. Para a maioria dos escoamentos naturais, a precisão, associada ao método explícito, é suficiente para se obterem bons resultados.

Para calcular a velocidade em qualquer ponto do domínio, é utilizada uma interpolação linear (cf. *Figura 15*), também neste caso se poderia optar por um método de interpolação mais preciso, como a interpolação bilinear utilizada por Monteiro (1995), embora este aumento de precisão torne o algoritmo mais lento.



*Figura 15- Cálculo da velocidade média dos traçadores.*

Às velocidades  $U_x$  e  $U_{x+dx}$ , segundo  $x$ , nas faces 1 e 2 podem ainda ser adicionadas uma velocidade de deriva devido ao vento, uma velocidade representativa do transporte difusivo e ainda a velocidade de espalhamento do petróleo.

### 6.1.1 Termo difusivo

O transporte turbulento é forçado pelos vórtices não resolvidos pelo modelo. O efeito destes vórtices, sobre os traçadores, depende da razão entre o tamanho dos vórtices e dos traçadores. Os vórtices maiores que os traçadores induzem um movimento aleatório ao traçador, como está esquematizado na *Figura 16*.

### 6.1.2 Deslocamento aleatório

O movimento aleatório é calculado recorrendo ao procedimento adoptado por Sullivan, 1971, e por Allen, 1982. Este movimento é calculado utilizando o comprimento de mistura e o desvio padrão da velocidade turbulenta, obtidos a partir do fecho turbulento adoptado no modelo hidrodinâmico. Os traçadores mantêm a velocidade aleatória ou turbulenta durante o tempo necessário para percorrer o comprimento de mistura.

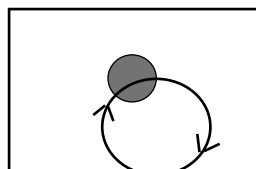




Figura 16- Movimento aleatório forçado por vórtices maiores que o traçador (círculo cinzento).

O método utilizado para calcular o deslocamento aleatório dos traçadores admite  $\Delta s$  igual ao comprimento de mistura e  $\Delta t$  igual ao tempo que o traçador demora a percorrer  $\Delta s$ . Nestas condições, a velocidade aleatória passa a ser  $u' = \Delta s / \Delta t$ . Para ser consistente, a metodologia *random walk* deve permitir que os traçadores mantenham a sua velocidade aleatória durante o período anteriormente referido que, em condições normais, é diferente do passo temporal do modelo hidrodinâmico.

Allen (1982) calcula a dispersão de uma pluma, impondo um movimento aleatório, igual em módulo ao comprimento de mistura e com igual probabilidade de ser positivo ou negativo. O tempo, durante o qual um traçador faz um salto aleatório, é igual ao comprimento de mistura a dividir pelo desvio padrão da velocidade turbulenta,  $\Delta t = L / \sqrt{u'u'}$ . A velocidade aleatória é imposta como função das condições locais de turbulência. O modelo de traçadores admite turbulência isotrópica no plano horizontal, mas na vertical a dispersão anisotrópica é simulada explicitamente.

Na horizontal o comprimento de mistura é independente da direcção que o traçador toma no processo aleatório, mas na vertical o valor do comprimento mistura depende da trajectória aleatória ascendente ou descendente do traçador. Desta forma é possível simular o efeito da estratificação na mistura vertical e simular com modelos deste tipo, acoplados a modelos de turbulência, a produção primária em oceano aberto (Miranda et al., 1999).

A abordagem que utiliza o conceito de comprimento de mistura e de desvio padrão da velocidade turbulenta visa simular a trajectória turbulenta dos traçadores de uma forma fisicamente realista. Se se considerar um meio onde o fluxo de massa segundo  $x$  é apenas forçado pela turbulência e se emitir um conjunto de traçadores num ponto  $x=0$ , a taxa de dispersão destes pode ser escrita na forma (Tennekes, 1972):

$$\frac{d}{dt}(\overline{x^2}) = 2x \frac{dx}{dt} = 2x\overline{u'}$$

A taxa de dispersão não é mais que a taxa a que a variância da variável estatística, distância à origem, varia no tempo. A correlação entre  $x$  e  $u'$  de um traçador em movimento é muito baixa para lá do comprimento de mistura, isto é,  $\overline{xu'} \rightarrow 0$  para  $x > L$ . Assim sendo, o valor de  $\overline{xu'}$  pode ser estimado como sendo da ordem de  $u_T L$ , em que  $u_T = \sqrt{u'u'}$  é a raiz quadrada da variância da velocidade turbulenta segundo  $x$  e  $L$  o comprimento de mistura.

Na metodologia *random walk* o comprimento de mistura ( $L$ ) não é mais que a distância que o traçador tem que percorrer para “esquecer” a sua velocidade aleatória (ou turbulenta) inicial  $u'$ , que é reinicializada recorrendo a uma distribuição estatística de média nula e variância  $u_T^2$ , sempre que o traçador percorre a distância  $L$ . Num meio isotrópico  $L$  tem um valor constante mas, para meios estratificados e junto de fronteiras sólidas, este valor é variável.

Nesta metodologia, o intervalo de tempo que separa dois deslocamentos aleatórios não é uma constante especificada pelo utilizador, mas também uma variável aleatória uma vez que  $\Delta t = L / u_T$ , o que pode levantar problemas de ordem prática, especialmente para escoamentos com comprimento de mistura fortemente variável. Em zonas onde  $L$  é muito pequeno (por exemplo junto a uma fronteira sólida)  $\Delta t$  é igualmente pequeno tornando o algoritmo demasiado lento. Por vezes, com o

objectivo de aumentar a eficiência do algoritmo, é admitido que  $L$  e  $u_T$  tomam valores constantes em todo o domínio o que indirectamente equivale a admitir  $\Delta t$  constante, uma vez que  $\Delta t = L/u_T$ .

## 6.2 EMISSÃO DOS TRAÇADORES

No que concerne ao tempo, a emissão dos traçadores pode ser dividida em duas grandes classes instantânea ou contínua. Na primeira é apenas necessário definir a localização e a massa emitida, enquanto na segunda, em vez de massa é necessário definir uma vazão mássica que pode ser constante ou variável. Se o utilizador optar por uma vazão variável é necessário definir uma série temporal que indique a sua variação em função da data.

Quanto à localização pode ser por caixas e acidente. Na emissão por caixas o utilizador tem que definir um polígono onde é efectuada a emissão (Figura 17).

No caso da emissão que se designou de acidente é também dada a localização geográfica, mais o volume emitido e a espessura inicial (opcional). Neste caso, o modelo distribui, de uma forma circular as partículas em torno da localização pontual definida.

Estes são tipos de emissão principais, mas podem ser efectuadas emissões híbridas. Por exemplo, para simular uma derrame de um petroleiro de uma forma realista é possível fazer uma emissão que, no instante inicial, é do tipo do acidente no espaço e instantânea no tempo (rombo instantâneo do casco do navio) considerando-se que, após o derrame inicial, a emissão é feita pontualmente no espaço em contínuo no tempo (derrame lento de crude ainda armazenado nos tanques do navio).

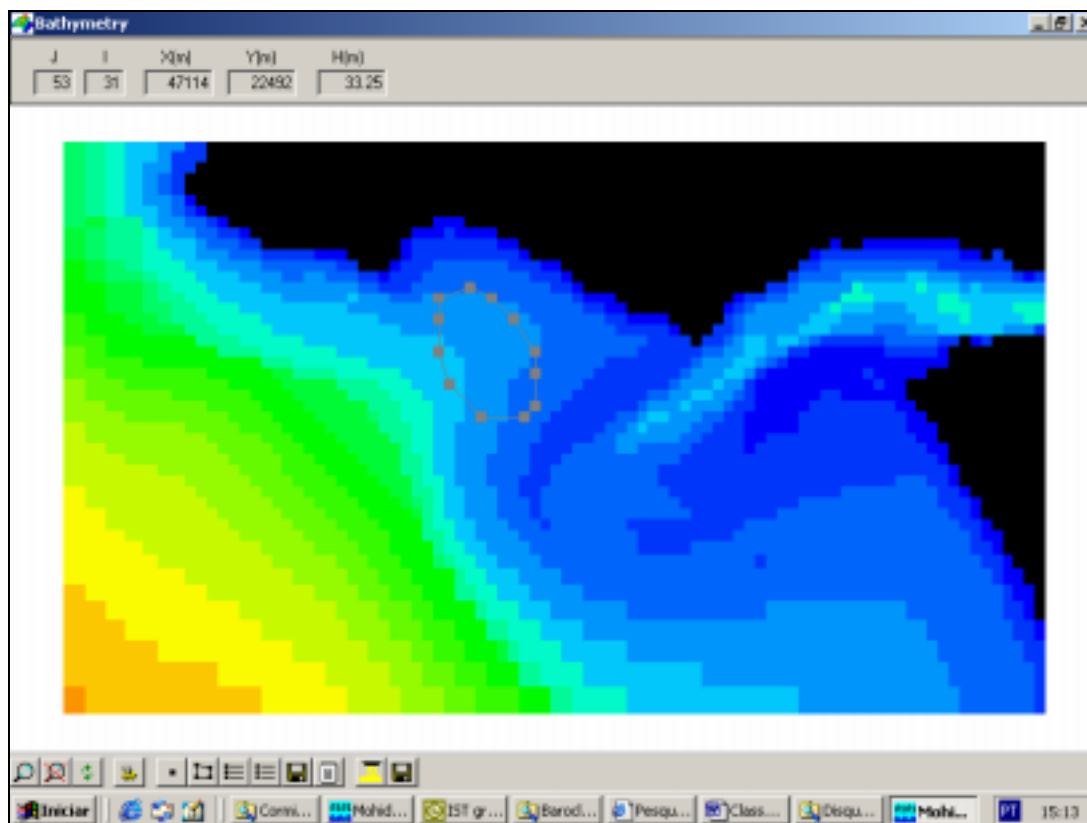


Figura 17 – Definição dos limites de um derrame, emissão por caixas.

### 6.3 CONDIÇÕES DE FRONTEIRA

Neste modelo são considerados dois tipos de fronteira: fronteiras com água e com terra. Para as fronteiras com água é adoptado o critério de eliminação do traçador, caso este saia do domínio. Se o traçador for arrastado para um ponto de terra, o utilizador pode optar na entrada de dados, por recolocar o traçador na sua posição imediatamente anterior ou admitir que o traçador fica retido na totalidade ou parcialmente na linha de costa. O utilizador pode ainda optar por considerar que uma destas opções é tomada pelo modelo função do tipo de costa. No caso dos hidrocarbonetos a primeira opção é normalmente adoptada em costas rochosas e a segunda em costas de areia.

## 7 Interface Gráfica do modelo Mohid

O modelo *Mohid* tem uma interface gráfica que permite ao utilizador gerir os dados de entrada do modelo, executar o programa e analisar os resultados produzidos. Esta interface foi escrita em *Fortran* e utiliza:

- as rotinas do modelo *Mohid* para a leitura e validação dos dados de entrada;
- as bibliotecas do *MS Windows SDK (Software Development Kit)* para a geração de janelas;
- as bibliotecas do *OpenGL (Open Graphics Language)* para a visualização dos resultados.

A programação da interface segue os mesmos conceitos da programação por objectos já utilizados na programação do modelo *Mohid* e foi desenvolvido pelos mesmos autores do modelo *Mohid*. Este fato é importante de salientar, pois garante que em desenvolvimentos futuros será sempre fácil de manter a mesma interface gráfica sincronizada com o desenvolvimento do modelo.

A *Mohid GUI* foi desenhada para correr em ambientes WindowsNT e Windows 2000 e pode igualmente correr, com algumas limitações em outras plataformas.

### 7.1 ORGANIZAÇÃO DE UM PROJETO

A partir da *Mohid GUI*, o utilizador tem a possibilidade de organizar o projecto em várias simulações que por sua vez são constituídas por vários *Runs*. A execução de um projecto normalmente será sempre constituída por mais do que uma simulação, sendo por isso a organização hierárquica a mais adequada. Cada *Run* necessita de arquivos de dados e produz resultados para cada parte modular do programa utilizada. Os resultados produzidos podem ser sob a forma de arquivos de continuação de cálculo, arquivos com resultados em instantes pré-seleccionados em toda a malha e arquivos de resultados do tipo séries temporais.

Para uma melhor organização de todos os arquivos associados, a interface gráfica do modelo *Mohid* constrói automaticamente uma árvore de directórios, que permite ao utilizador, caso deseje, encontrar mais facilmente um dado arquivo (a necessidade de encontrar um dado arquivo é relativa, uma vez que a partir da interface gráfica o utilizador pode fazer todas as tarefas). Esta árvore de directórios é dividida na seguinte maneira:

- no directório de topo reside o arquivo que contém as informações sobre o projecto e um subdirectório para cada simulação que faz parte do projecto;
- em cada subdirectório são criados três directórios, um que contém os arquivos de dados das corridas, outro em que é executado o código do modelo e um terceiro no qual são guardados os resultados do modelo;
- cada *Run* de uma simulação é identificada por um ID e a partir desse ID são construídos os nomes dos arquivos para cada parte modular do programa e um subdirectório no directório dos resultados que contém os resultados das séries temporais;

- cada parte modular tem um arquivo de entrada de dados, um arquivo de resultados transientes com saídas das propriedades em toda a malha de cálculo e um arquivo que serve para continuar posteriormente o cálculo.

Os nomes dos arquivos de dados de entrada são construídos automaticamente da seguinte maneira: *nome de parte modular do programa + \_ + ID + .dat*. Por exemplo o arquivo de entrada de dados do módulo de turbulência será "Turbulence\_5.dat", caso o *Run* tenha o ID 5. Os arquivos de resultados são construídos da mesma maneira, chamando-se por exemplo "TransienteTurbulence\_5.hdf".

De notar que este processo da geração de nomes de arquivos, identificação por ID's, criação de directórios e subdirectórios é automatizada pela interface gráfica do modelo *Mohid*. Na Figura 18 mostra-se um exemplo deste tipo de organização. Neste caso o projecto é chamado "Estuaries" e é constituído por 12 simulações (Mira, Douro, Minho, etc.). Na Figura 18 são visíveis os *Runs* correspondentes ao estuário do Mira, estando actualmente o "Run\_Particle" seleccionado. Na lista da direita aparecem as opções de cálculo para cada parte modular do programa (*Model, Hydrodynamic, Bottom, etc.*), sendo aí dada a opção ao utilizador de modificar os parâmetros de cálculo de cada uma das partes modulares referidas.

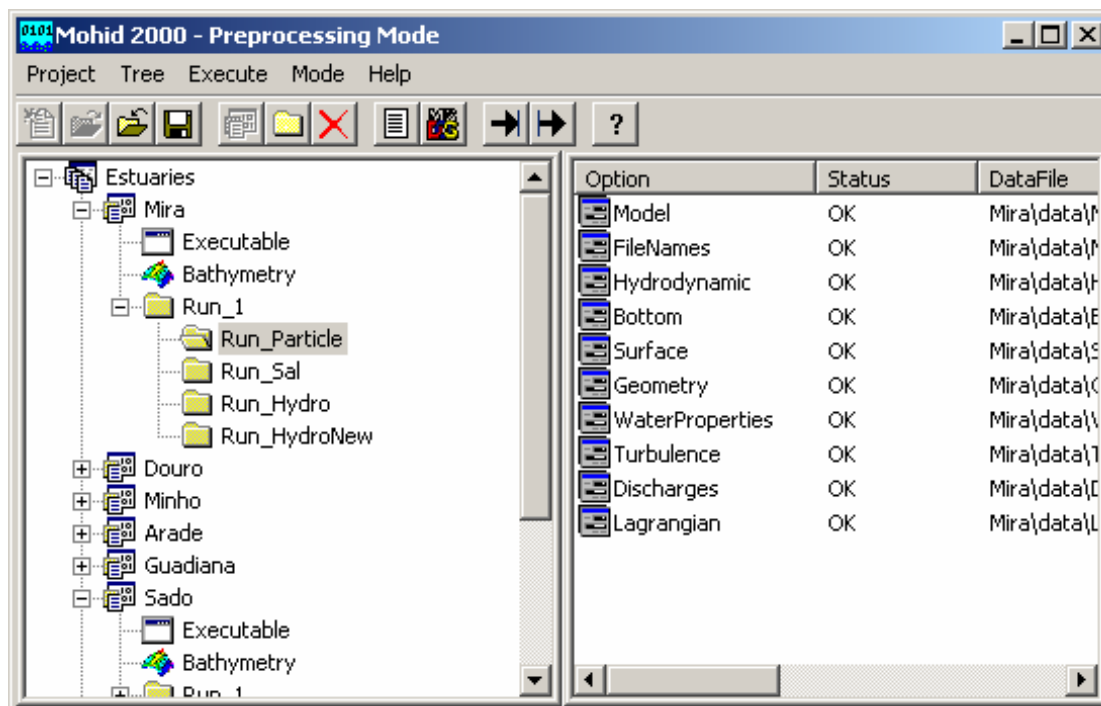


Figura 18: Organização hierárquica das corridas no modelo *Mohid*

## 7.2 ENTRADA DE DADOS

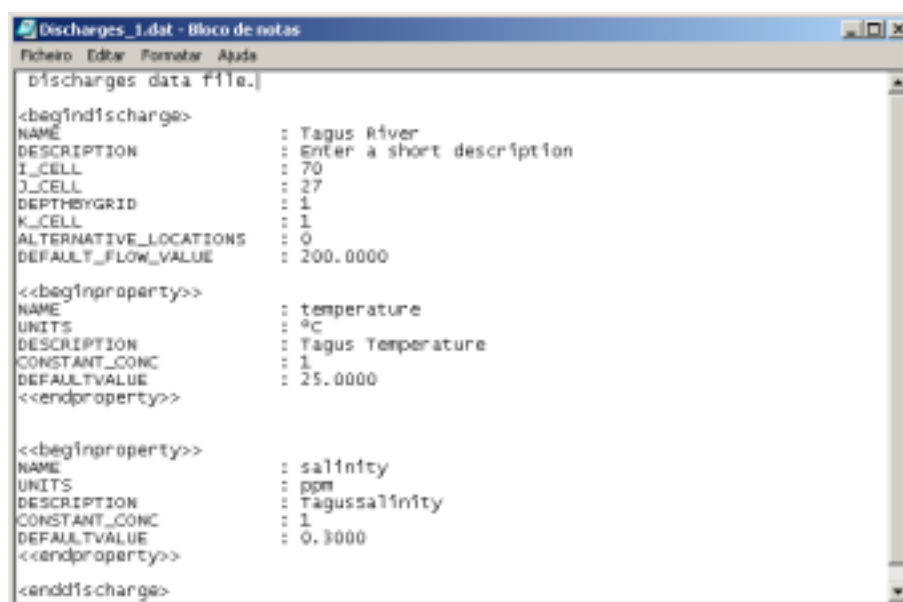
A entrada de dados para modelos numéricos pode ser feita sob várias formas como, por exemplo, por interacção directa com o utilizador, em arquivos de dados sequenciais ou em arquivos com formato organizadas por tópicos.

A organização dos arquivos de dados do modelo *Mohid* é fruto de uma experiência muito longa no desenvolvimento de ferramentas da família *Mohid*. É frequente nos modelos numéricos falar-se em erros de programação, mas o fornecimento

de dados pelo utilizador do modelo é normalmente uma das fontes de erros mais significativa. Estes erros podem ter duas origens: distração do utilizador ao definir os dados ou desconhecimento das hipóteses e/ou dos conceitos que estão na base do modelo. Se estas fontes de erros não são minimizadas, a operacionalidade do modelo não é garantida.

O modelo *Mohid* recebe todos os dados através de arquivos em formato ASCII (*American Standard Code for Information Exchange*). Este formato é independente, tal como o modelo *Mohid*, do sistema operativo. Estes arquivos são organizados por blocos de informação e por palavras-chaves, numa forma semelhante ao XML (*Extensible Markup Language*), e podem ser construídas num editor de texto (tipo "Notepad") ou através da interface gráfica do modelo *Mohid*. No início do cálculo o modelo verifica a consistência entre os dados fornecidos.

A Figura 19 mostra um arquivo de dados que é fornecido ao modelo *Mohid*. Neste caso trata-se dum arquivo de descargas de água para o rio Tejo, associadas a uma temperatura e uma salinidade.



```
Discharges_1.dat - Bloco de notas
Ficheiro Editar Formatar Ajuda
discharges data file.]
<begindischarge>
NAME           : Tagus River
DESCRIPTION    : Enter a short description
I_CELL        : 70
J_CELL        : 27
DEPTHBYGRID   : 1
K_CELL        : 1
ALTERNATIVE_LOCATIONS : 0
DEFAULT_FLOW_VALUE : 200.0000

<<beginproperty>>
NAME           : temperature
UNITS          : °C
DESCRIPTION    : Tagus Temperature
CONSTANT_CONC : 1
DEFAULTVALUE   : 25.0000
<<endproperty>>

<<beginproperty>>
NAME           : salinity
UNITS          : ppm
DESCRIPTION    : Tagussalinity
CONSTANT_CONC : 1
DEFAULTVALUE   : 0.3000
<<endproperty>>
<enddischarge>
```

Figura 19: Arquivo de dados do modelo *Mohid*

Na Figura 19 é facilmente visível a organização por blocos da informação (uma descarga é incorporada entre as linhas `<begindischarge>` e `<enddischarge>` e uma propriedade de água associada a uma descarga entre as linhas `<<beginproperty>>` e `<<endproperty>>`). Nesta figura é igualmente visível o conceito de palavra-chave (*keyword*). Qualquer valor fornecido ao modelo *Mohid* é precedido por uma palavra-chave, como por exemplo a palavra-chave "Default\_Flow\_Value".

Como já referido anteriormente, o utilizador tem a possibilidade de construir estes arquivos a partir da interface gráfica do modelo *Mohid*. A Figura 20 mostra a interface gráfica relativo ao arquivo de dados da Figura 19.

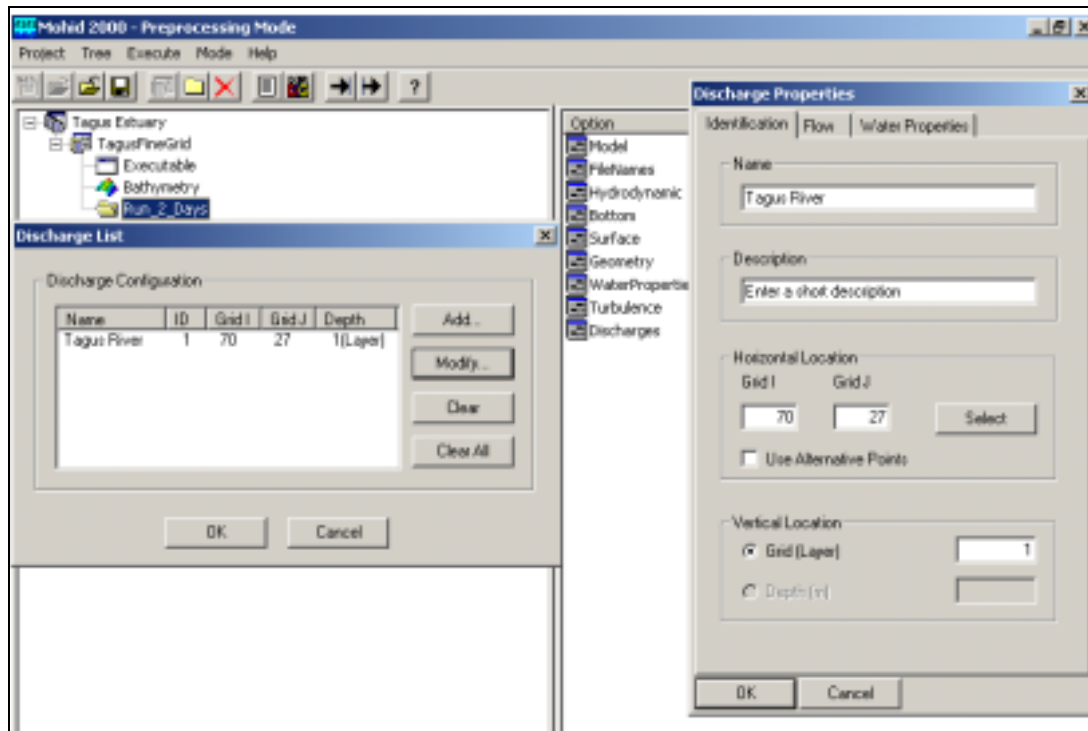


Figura 20: Construção de um arquivo de dados a partir da GUI

Todas as partes modulares do modelo *Mohid* têm a mesma filosofia na construção dos arquivos de dados. Em todas as partes modulares as palavras-chave com o mesmo sentido têm o mesmo nome. Se, por exemplo, o utilizador quer especificar o intervalo entre saídas de resultados em toda a grelha, a palavra-chave é sempre `OUTPUT_TIME`, independentemente da parte modular do programa, dando assim uma consistência adicional ao modelo (mais informações sobre a saída de resultados serão fornecidas mais à frente).

Além dos arquivos de dados numéricos acima descritos, que indicam ao modelo os parâmetros de cálculo, existem dados que têm ser fornecidos por intermédio de séries temporais ou de matrizes. Estes dados podem ser variados (dados meteorológicos, vazões de rios, derrames acidentais, etc.), e podem ser fornecidos no formato 1D, 2D ou 3D.

Ainda existe a possibilidade destes dados serem variáveis ou não no tempo. O modelo *Mohid* utiliza para estes casos sempre formatos muito parecidos, sendo assim mais fácil para o utilizador do modelo fornecer os dados correctos. A Figura 21 mostra um exemplo de um arquivo com séries temporais que é lido pelo modelo *Mohid*. Neste caso trata-se do fornecimento de dados 1D que são variáveis no tempo. A partir das unidades do tempo (palavra-chave `Time_Units`) e da data inicial da série (palavra-chave `Série_Initial_Data`) o modelo constrói todos os dados necessários para o intervalo de execução. A interface gráfica do modelo *Mohid* é acompanhada por um arquivo de *MS Excel*, que contém macros que ajudam o utilizador a escrever este tipo de arquivo de dados.

Discharges para a Barragem do Roxo durante o ano Hidrológico 1996/1997 e 1997/1998

Day	Degebe	Alcarr	Taliga	Oliven	Guadiana	ME	OutFlow	Tar	SST	Nitra	Anno
0	2.346	1.384	0.305	0.082	23.46	0.762	-16.391	20.0	31.71	4.66	0.66
31	24.887	14.683	3.235	0.871	248.866	8.088	-12.224	18.0	12.49	8.81	0.93
61	28.652	16.905	3.725	1.003	286.517	9.312	-12.728	17.0	18.16	8.32	1.63
92	10.404	6.138	1.353	0.364	104.04	3.381	-12.805	6.5	28.17	9.58	0.73
123	2.005	1.183	0.261	0.07	20.05	0.652	-11.369	16.8	30.83	9.65	0.65
151	2.19	1.292	0.285	0.077	21.899	0.712	-13.748	18.6	41.44	9.82	0.71
182	1.525	0.9	0.198	0.053	15.252	0.496	-19.599	17.8	30.67	11.75	0.69
212	2.49	1.469	0.324	0.087	24.9	0.809	-18.409	16.8	29.64	4.39	0.72
243	0.395	0.233	0.051	0.014	3.947	0.128	-167.451	20.2	21.57	3.72	0.65
273	0.408	0.241	0.053	0.014	4.079	0.133	-279.059	16.8	34.27	3.60	0.72
304	0.408	0.241	0.053	0.014	4.079	0.133	-240.673	23.0	28.86	4.77	0.24
335	0.395	0.233	0.051	0.014	3.947	0.128	-74.873	19.5	28.61	4.66	0.38
365	2.346	1.384	0.305	0.082	23.46	0.762	-16.391	20.0	31.71	8.81	0.66
396	24.887	14.683	3.235	0.871	248.866	8.088	-12.224	21.0	12.49	8.32	0.93
426	28.652	16.905	3.725	1.003	286.517	9.312	-12.728	15.0	18.16	9.58	1.63
457	10.404	6.138	1.353	0.364	104.04	3.381	-12.805	14.0	28.17	9.65	0.73
488	2.005	1.183	0.261	0.07	20.05	0.652	-11.369	13.2	30.83	9.82	0.65
516	2.19	1.292	0.285	0.077	21.899	0.712	-13.748	17.4	41.44	11.75	0.71
547	1.525	0.9	0.198	0.053	15.252	0.496	-19.599	15.0	30.67	4.72	0.69
577	2.49	1.469	0.324	0.087	24.9	0.809	-18.409	15.8	29.64	4.39	0.72
608	0.395	0.233	0.051	0.014	3.947	0.128	-167.451	20.0	21.57	3.72	0.65
638	0.408	0.241	0.053	0.014	4.079	0.133	-279.059	21.2	34.27	3.60	0.72
669	0.408	0.241	0.053	0.014	4.079	0.133	-240.673	28.4	28.86	4.77	0.24
700	0.395	0.233	0.051	0.014	3.947	0.128	-74.873	24.4	28.61	4.77	0.38
732	2.346	1.384	0.305	0.082	23.46	0.762	-16.391	16.5	31.71	4.66	0.66

Figura 21: Fornecimento de séries temporais

Os dados que são fornecidos em matrizes têm um formato parecido com o formato indicado na Figura 21 e que é sempre igual para cada parte modular do programa *Mohid*.

### 7.3 SAÍDA DE RESULTADOS

A saída de resultados do modelo pode ser especificada pelo utilizador, através dos arquivos de dados. Como já referido anteriormente existem dois tipos de resultados no modelo *Mohid*. Para cada parte modular do programa, existe a hipótese de escrever os resultados para toda a grelha no formato HDF ou na forma de séries temporais no formato ASCII. O intervalo entre as saídas dos resultados pode ser especificado pelo utilizador, quer para as séries temporais, quer para os resultados em toda a malha.

O formato dos arquivos de resultados na forma de séries temporais, é igual ao formato de entrada de séries temporais (como indicado na Figura 21). A interface gráfica do modelo *Mohid* é acompanhada por uma macro que permite importar estes resultados numa folha de *Excel*. Igualmente é possível abrir estes resultados directamente no Excel a partir da interface gráfica.

O formato adoptado para a escrita de valores em toda a malha, o HDF, tem várias vantagens, nomeadamente:

- é independente do sistema operativo em que formam escritos os arquivos;
- necessita pouco espaço no disco, pois utiliza internamente um algoritmo de compressão;
- é auto descritivo;
- é um formato com um universo de utilização muito alargado.



O desenvolvimento e a manutenção deste formato é da responsabilidade da NCSA (*National Center for Supercomputing Applications* dos EUA).

## 7.4 VISUALIZAÇÃO DOS RESULTADOS

Qualquer pessoa ligada a modelação sabe que a visualização dos resultados produzidos por um modelo numérico pode ser um processo demorado e trabalhoso. Com o objectivo de facilitar a análise dos resultados, a *Mohid GUI* incorpora um pós-processador que se pode dividir duas partes. Existe uma parte em que o utilizador pode seleccionar a informação que pretende representar e outra parte a da visualização propriamente dita.

A selecção da informação é muito facilitada pelo fato de que os arquivos transitórios de resultados são escritos em HDF. Ao abrir um arquivo de HDF a *Mohid GUI* mostra a árvore de informação contida neste arquivo. Na Figura 22 são apresentados dois arquivos HDF, abertos com o *browser* da *Mohid GUI* e as hipóteses para o utilizador ver as propriedades do cada conjunto de resultados, tal como a hipótese de exportar os dados para outros formatos.

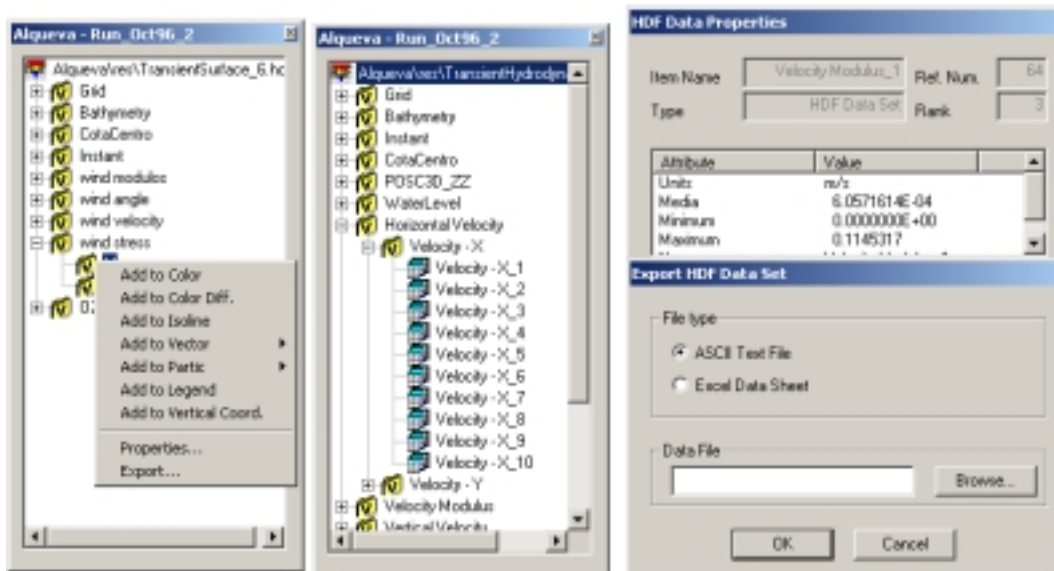


Figura 22: Opções do Browser do arquivos transientes

Com os resultados disponíveis, o utilizador tem a hipótese de gerar mapas de cores, linhas de contorno, mapas de vectores, traçadores lagrangeanos ou diferenças entre campos de cores. A representação pode ser feita da malha inteira ou de qualquer sub-malha e em qualquer plano do modelo tridimensional (XY, XZ ou YZ), conforme as especificações do utilizador. Existe a possibilidade de sobrepor vários mapas ao mesmo tempo. Para cada tipo de mapas, o utilizador tem a possibilidade de escolher entre vários tipos:

- os mapas de cores podem ser representados em escalas de cores contínuas ou discretas, deixando ao utilizador a liberdade de escolher o tipo de escala a utilizar (tons de azul, tons do arco íris, etc.). É possível representar qualquer escala de cores imaginária;

- as linhas de contorno são um bom complemento para as escalas de cores, ou podem representar uma outra propriedade, de modo a cruzar a informação representando no campo de cores a evolução da propriedade representada com as linhas de contorno;
- os mapas de vectores são indispensáveis para representar velocidades, pois permitem, numa forma fácil, representar a intensidade e a direcção ao mesmo tempo. O utilizador da *Mohid GUI* tem a hipótese de escolher entre várias formas de representar os mapas de vectores;
- os traçadores lagrangeanos podem ser visualizados com diferentes escalas de cores ou com cor uniforme, permitindo ao mesmo tempo ao utilizador visualizar a história da trajectória, que é muito útil para as manchas de petróleo.

Após a selecção completa da informação a representar, o utilizador pode visualizar os resultados na tela ou gravar as imagens como arquivos independentes no disco rígido. Um utilitário chamado "*Sequence*" permite ao utilizador controlar a velocidade da representação na tela, ou seja controlar o tempo real *versus* o tempo simulado.

As figuras gravadas no disco rígido podem ser utilizados para fazer animação em formato "gif", "avi" ou similares, recorrendo a programas disponíveis para este fim (por exemplo o *Paint Shop Pro*).

## 8 Manual Técnico do Módulo de Petróleo

Este documento descreve a estrutura interna do Módulo de Petróleo (*ModuleOil*), a interface e as ligações com as partículas.

Neste documento são ainda referidas as principais opções tomadas na elaboração do modelo. Mais do que justificar as opções (em muitos casos discutíveis ou pelo menos de aplicação não universal) pretende-se apresentá-las.

### 8.1 ESTRUTURA INTERNA

O Módulo do Petróleo foi desenvolvido de acordo com o paradigma da Programação Orientada por Objectos (POO). Seguindo a filosofia da POO os métodos que compõem este módulo estão agrupados em quatro funções:

- Construtor;
- Selector;
- Modificador;
- Destruitor.

#### 8.1.1 Construtor

O construtor contém o conjunto de métodos executados quando um objecto Petróleo é criado. Existe um método público no construtor - o *StartOil*.

#### 8.1.2 Selector

O selector é composto por vários métodos públicos que possibilitam a partilha de informação gerada pelo Módulo de Petróleo.

#### 8.1.3 Modificador

O modificador contém três métodos públicos, a função *F\_FayArea*, o *OilInternalProcesses* e o *OilActiveProcesses*.

A função *F\_FayArea* serve para estimar a área inicial de um derrame de Petróleo. O método *OilInternalProcesses* calcula a evolução de propriedades do óleo (como a densidade e viscosidade) e os processos de envelhecimento, tais como a evaporação, a mistura na coluna de água, o efeito de mousse de chocolate, a dissolução, sedimentação de petróleo e remoção por dispersantes químicos e meios mecânicos. Os valores relativos a estes processos de envelhecimento são integrais, pelo que os valores que servem de base a estes cálculos são a área e o volume total instantâneo do derrame e valores ambientais do vento, temperatura, salinidade e matéria particulada em suspensão da água, etc. Em cada passo de

cálculo, este método calcula os processos, actualizando a massa após a computação de cada processo. No final de cada passo de cálculo, são determinadas as propriedades do óleo (densidade e viscosidade).

No caso do método *OilActiveProcesses* o resultado é a velocidade instantânea de espalhamento da mancha que pode ser efectuado por dois processos diferentes. Um deles baseia-se nos gradientes de espessura da mancha de petróleo. Outra forma de calcular as velocidades instantâneas é através de cálculos de velocidades aleatórias, proporcionais a coeficientes de difusão. Estes são obtidos a partir das fórmulas empíricas de Fay. Esta velocidade é somada ao campo de velocidades obtida no Módulo das Partículas - *ModuleLagrangian* (em que entra a hidrodinâmica, o vento, etc.) e é o resultado desta soma que é utilizado para mover as partículas que compõem o derrame.

### 8.1.4 Destrutor

O destrutor, *KillOil*, é invocado no momento em que se pretende libertar a memória ocupada pelo Módulo de Petróleo.

## 8.2 MÉTODOS DE APOIO AO MODELO DE PETRÓLEO

Como é natural, no processo de escrita do modelo de Petróleo surgiu a necessidade de adaptar o programa MOHID2000 de forma a possibilitar a interacção entre as partículas e o Módulo de Petróleo.

Quando o modelo de Petróleo é activado, uma variável (lógica) de estado das Partículas (*Oil*) fica verdadeira. Esta variável é utilizada ao longo de todo o código das Partículas para identificar as chamadas a código que deve ser corrido no caso particular de se estar a fazer a simulação de derrames.

### 8.2.1 Inicialização do Módulo de Petróleo

Foi necessário criar métodos para inicializar as partículas segundo um “acidente”, ou em “caixa”. As alterações foram feitas acrescentando os métodos públicos *EmissionAccident* e *EmissionBox*.

#### 8.2.1.1 A inicialização de acidentes

A inicialização dos acidentes começa pela estimativa da área total inicial da mancha utilizando a expressão de Fay (ver 8.1.1), ou um valor da espessura média da mancha fornecido pelo utilizador. Este especifica o número de partículas que pretende utilizar na simulação. Assume-se que inicialmente do acidente é circular e, com base nisto, calcula-se o raio do acidente. Cada partícula é lançada num ponto aleatório (segundo uma distribuição uniforme) dentro da circunferência desde que a célula proposta não seja terra.

### 8.2.1.2 Inicialização em caixa

Sendo conhecido o volume derramado, espessura média da mancha, e o volume de cada partícula (opcional; por defeito assume-se uma partícula por célula), as partículas são distribuídas aleatoriamente (segundo uma distribuição uniforme) nas células ocupadas pela caixa.

### 8.2.2 Cálculo da área e volume totais do derrame

Ao longo do cálculo é necessário saber o valor integrado da área e volume da mancha. Foi criado o método privado *ComputeAreaVolume*.

A área total ocupada pela mancha é calculada somando as áreas das células onde existe pelo menos uma partícula (centro de massa).

O volume total de petróleo é calculado somando o volume de todas as partículas dentro do sistema. Em cada iteração do modelo algumas partículas podem desaparecer devido a saírem do domínio, darem à costa, etc.

### 8.2.3 Espessura média de petróleo em cada célula

No Módulo das Partículas foi criado um método que calcula a espessura média da mancha em cada célula do modelo. Trata-se do método privado *FillGridThickness*. A espessura média de petróleo numa célula do modelo hidrodinâmico é obtida dividindo a soma do volume de partículas cujo centro de massa está dentro dessa célula pela área mesma.

### 8.2.4 Troca de informação com o método responsável pelo envelhecimento do petróleo

Uma vez que à excepção do espalhamento, todos os processos e propriedades do petróleo são calculados para o conjunto do óleo derramado por determinada origem, e não para cada partícula individualmente, houve necessidade de criar um método (*InternalParticOil*) responsável pela troca de informação referente a determinadas condições ambientais e volume de óleo, com o método responsável pelo envelhecimento do petróleo (*OilInternalProcesses*). Assim, em cada passo de cálculo, são fornecidas as condições ambientais (assumindo que essas condições são invariáveis para a mancha, e iguais às condições verificadas na origem do derrame) e também o volume, equivalente ao somatório do volume das partículas (8.2.2). O método *OilInternalProcesses* calcula então o novo volume após o envelhecimento, entrando este como argumento para o método *InternalParticOil*, para o cálculo do novo volume de cada partícula.

## 8.3 LIGAÇÃO AO MOHID2000

A Figura 23 representa a ligação do módulo de partículas do modelo hidrodinâmico MOHID2000 à classe de petróleo. As ligações descritas são ao nível do construtor e do modificador da classe de petróleo.

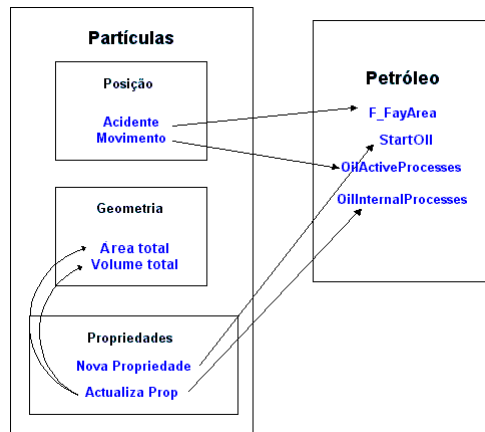


Figura 23 – Relação entre o módulo das partículas do modelo MOHID2000 e a classe Petróleo

A inicialização das partículas calcula, por esta ordem:

1. A posição inicial de cada partícula;
2. A geometria de cada partícula;
3. As propriedades transportadas por cada partícula.

A simulação de acidentes de petróleo implicou a criação de novos tipos de disposição inicial de partículas, em acidente ou em caixa (estas inicializações estão descritas no capítulo 8.2.1). A inicialização das propriedades chama a inicialização da classe Petróleo.

Durante a simulação do derrame dois modificadores da classe Petróleo são invocados:

1. *OilActiveProcesses* (8.1.3) modela a influência do derrame de petróleo no movimento das partículas, neste caso a influência sobre o espalhamento, é chamado pelo método de cálculo do movimento (*MovePartic*) do módulo das partículas;
2. *OilInternalProcesses* (8.1.3) modela os processos do petróleo que não influenciam o movimento, sendo apenas calculados os fluxos entre as diferentes fases (por exemplo a emulsificação) do petróleo assim como a transferência com outros meios (por exemplo evaporação ou mistura com a coluna de água), sendo chamado pelo método *OilInternalParticOil* do módulo das partículas.

## 8.4 OUTPUT

O output do Módulo de Petróleo é feito para um ficheiro ASCII. Este ficheiro contém a série temporal, formatada em colunas de forma a ser facilmente lido pelo Excel ou qualquer outro programa de graficação. Estas séries contêm:

- Área da mancha;

- Volume da mancha (água+óleo);
- Volume de óleo;
- Espessura da mancha;
- Massa de petróleo no derrame;
- Volume, massa e fracção de petróleo evaporada;
- Volume, massa e fracção de petróleo dispersa;
- Volume, massa e fracção de petróleo sedimentada;
- Volume, massa e fracção de petróleo dissolvida;
- Volume, massa e fracção de petróleo disperso quimicamente;
- Volume, massa e fracção de emulsão (água+óleo) removido mecanicamente;
- Conteúdo mássico e volúmico de água resultante da emulsificação;
- Densidade do petróleo;
- Viscosidade do petróleo.

## 8.5 ENTRADA DE DADOS

A entrada de dados é feita de acordo com o estabelecido para o modelo MOHID2000, utilizando o módulo EnterData.

## 8.6 PALAVRAS-CHAVE

O módulo do petróleo encontra-se integrado no módulo lagrangeano, pelo que os dados relativos ao petróleo são definidos através do reconhecimento das respectivas palavras-chave no ficheiro de dados do módulo lagrangeano.

De seguida apresentam-se as palavras-chave que no ficheiro de entrada de dados mencionado, estão relacionadas com a previsão de derrames de petróleo.

Palavra-chave	Forma	Valor por defeito	Definição
---------------	-------	-------------------	-----------

DT_PARTIC	sec.	[DT_Model]	Passo temporal das partículas
OUTPUT_TIME	sec. sec. sec.	[ ]	Tempo de saída de resultados
PARTIC_BOX	char	[ ]	Ficheiro que define a caixa das partículas

&lt;BeginOrigin&gt;

ORIGIN_NAME	char	[Origin_xx]	Nome da origem
OLD	0/1	[0]	Origem antiga (utilizado para cont. de cálculo)
GROUP_ID	integer	[1]	Grupo a que pertence a origem
EMISSION_SPATIAL	Point/Accident/Box	[-]	Tipo de emissão espacial
EMISSION_TEMPORAL	Continuous/Instantaneous	[-]	Tipo de emissão temporal
DT_EMIT	sec	[DT_PARTIC]	Intervalo entre emissões contínuas
START_PARTIC_EMIT	YYYY MM DD HH MM SS	[BeginModel]	Início da emissão
STOP_PARTIC_EMIT	YYYY MM DD HH MM SS	[EndModel]	Fim da emissão
NBR_PARTIC	int	[1]	Número de partículas em cada emissão
FLOW	real	[-]	Fluxo na origem (continuous emission)
POINT_VOLUME	real	[-]	Volume da emissão instantânea (point ou accident)
ACCIDENT_METHOD	Fay/Thickness	[Fay]	Forma de cálculo da área inicial do acidente
FLOAT	0/1	[0]	Partículas à superfície
THICKNESS_METERS	meters	[ ]	Espessura das partículas à superfície (apenas para inicialização Box ou Accident)
MOVEMENT	SullivanAllen/NotRandom	[ ]	Movimento aleatório horizontal
VARVELHX		[0.2]	Componente para o cálculo da vel. aleat. horiz.
VARVELH		[0.0]	Componente para o cálculo da vel. aleat. horiz.
ADVECTION	0/1	[1]	Mov. das partículas devido a vel. horizontal
TRAJECTORY_STEPS	int	[1]	Subdivisão dos passos temporais DT_PARTIC
WINDCOEF	real	[0.03]	Coefficiente de transferência do vento
POSITION_METERS	meters meters	[ ]	Posição X e Y da origem em metros
POSITION_CELLS	Cell Cell	[ ]	Posição X e Y da origem em células da malha
INCRP	int	[1]	Incremento das células na malha para preencher as caixas
BOX_NUMBER	int	[ ]	Número da caixa para associar à origem
BOXVOLINIC	real	[VolumeOfBox]	Volume inicial de uma partícula na caixa
THEORIC_AREA	0/1	[0]	Usa Theoric Area

&lt;&lt;BeginOil&gt;&gt;

OIL_TIMESERIE	char	[-]	Nome do ficheiro de resultados
DT_OUTPUT_TIME	real	[-]	Tempo entre saída de resultados
OIL_SPREADING	0/1	[1]	Uso de espalhamento natural do óleo
SpreadingMethod	Fay/ThicknessGradient	[ ]	Método de espalhamento
CoefVelMancha	4.	[4.0]	Coef. de vel. de espalhamento do grad. de espessura
OIL_EVAPORATION	0/1	[0]	Uso da Evaporação do óleo
EvaporationMethod	EvaporativeExposure/ PseudoComponents	[ ]	Método de evaporação do óleo
OIL_DISPERSION	0/1	[0]	Uso da dispersão do óleo
DispersionMethod	Delvigne/Mackay	[ ]	Método para a dispersão
OIL_EMULSIFICATION	0/1	[0]	Uso do processo de emulsificação
EmulsificationMethod	Mackay/Rasmussen	[ ]	Método para a emulsificação
OIL DISSOLUTION	0/1	[0]	Uso da dissolução
OIL SEDIMENTATION	0/1	[0]	Uso da sedimentação
OilType	Crude/Refined	[ ]	Tipo de óleo
API	Real	[-]	Gravidade API(American Petroleum Institute)
PourPoint	real (°C)	[-]	Ponto de corrimento
Cemuls	real (%)	[0.0]	Constante de emulsificação(% do óleo evaporado antes do início da emulsificação)
MaxVWaterContent	real (%)	[null_real]	Conteúdo volúmico máximo de água na emulsão
AsphalteneContent	real (%)	[-]	Conteúdo em asfaltenos
WaxContent	real (%)	[-]	Conteúdo em parafinas
TempViscRef	real (°C)	[-]	Temperatura da viscosidade de referência
ViscRef	real (cP)	[-]	Viscosidade dinâmica de referência
ViscCinRef	real (cSt)	[-]	Viscosidade cinemática de referência
OWInterfacialTension	real (Dyne/cm)	[-]	Tensão interfacial óleo-água
NbrDistCuts	Int	[0]	Número de frações destiladas
TDistExp	list(real) (°C)	[-]	Ponto de ebulição dos destilados
CPDistExp	list(real) (%)	[-]	Fracção volúmica cumulativa de óleo destilado
OIL_CHEM_DISPERSION	0/1	[0]	Aplicação de dispersantes químicos
P_AREA_SPRAYED	real (%)	[-]	% da área da mancha pulverizada com disp.



			químicos
EFFICIENCY	real (%)	[-]	% da área da mancha efectivamente dispersada
START_CHEM_DISPERSIO	YYYY MM DD HH MM SS	[BeginModel]	Início da aplicação de dispersantes químicos
END_CHEM_DISPERSION	YYYY MM DD HH MM SS	[EndModel]	Fim da aplicação de dispersantes químicos
OIL_MEC_CLEANUP	0/1	[0]	Uso de remoção mecânica
START_MEC_CLEANUP	YYYY MM DD HH MM SS	[BeginModel]	Início da operação de remoção mecânica
End_MEC_CLEANUP	YYYY MM DD HH MM SS	[EndModel]	Fim da operação de remoção mecânica
RECOVERY_DATAFORM	Rate / Amount	[ ]	Forma/unidades da indicação do óleo removido
RECOVERY	real (l/h or l)	[-]	Óleo removido

&lt;&lt;EndOil&gt;&gt;

&lt;&lt;EndOrigin&gt;&gt;

*Tabela 2 - Palavras-chave no ficheiro de dados do módulo lagrangeano, necessárias para a simulação de derrames de óleo*

São também utilizadas outras propriedades necessárias para o módulo de petróleo, estando definidas noutros ficheiros de entrada de dados:

-Ficheiro de entrada de dados do módulo WaterProperties:

Temperatura; salinidade; sedimentos coesivos

- Ficheiro de entrada de dados do módulo Surface:

Velocidade do vento; pressão atmosférica; período da onda; altura da onda

## 9 Propriedades dos Produtos Petrolíferos Utilizados no Modelo

Diversos produtos petrolíferos com diferentes características foram utilizados para validação do modelo, desde os óleos mais pesados aos mais leves e produtos refinados.

Neste capítulo descrevem-se as principais características dos óleos utilizados na realização do trabalho, incluindo aqueles para os quais não foram apresentados resultados no relatório e o óleo derramado no acidente do petroleiro Marão.

	Panuke	Statfjord	Sockeye	Kuwait	Udang	Fcc Heavy Cicle	Iranian Heavy									
Tipo de Óleo	Crude	Crude	Crude	Crude	Crude	Refinado	Crude									
Grupo	1	2	3	3	4	3	3									
API	50.8	37.8	26.2	30.6	14.3	24.3	30.0									
Ponto de corrimento (°C)	-36.0	-3.0	-12.0	-20.0	3.0	-58.0	-22.0									
Viscosidade dinâmica (cP)	-	-	45.0 (a 15°C)	-	-	-	-									
Viscosidade Cinemática (cSt)	1.0 (a 15°C)	6.0 (a 20°C)	-	8.0 (a 50°C)	9.0 (a 54 °C)	2.77 (a 15°C)	17.0 (a 21°C)									
Fracção máxima de água na emulsão (%)	-	-	87.0	90.0	-	0.0	-									
Constante de Emulsificação (%)	-	-	-	0.0	-	100.0	-									
Tensão interfacial óleo-água (dyne/cm)	29.1 (a 0°C)	27.3 (a 0 °C)	21.7 (a 0 °C)	29.1 (a 0 °C)	32.5 (a 15°C)	26.2 (a 0°C)	22.5 (a 15°C)									
Fracção de asfaltenos (%)	-	2.0	3.0	1.0	3.0	0.0	6.0									
Fracção de parafinas (%)	2.0	8.0	6.0	6.0	1.0	0.0	5.0									
Distribuição dos pontos de ebulição:	Fracção de massa (%)	Ponto de ebulição (°C)	1	40	2	40	2	40	5	97	1	160	5	178	2	40
			3	60	3	80	4	80	10	130	2	180	10	205	6	100
			9	80	5	100	6	100	15	153	3	200	20	220	11	140
			18	100	17	120	9	120	20	181	8	250	30	227	18	180
			29	120	20	140	12	140	25	208	15	300	40	237	21	200
			36	140	23	160	15	160	30	239	25	350	50	248	28	250
			44	160	26	180	18	180	35	264	35	400	60	256	36	300
			51	180	30	200	21	200	40	296	48	450	70	268	45	350
			57	200	39	250	30	250	45	312	59	500	80	280	53	400
			71	250	49	300	39	300	50	325	68	550	90	300	61	450
			85	300	59	350	48	350	55	335	76	600			69	500
			94	350	68	400	57	400	60	341	83	650			76	550
			98	400	77	450	66	450	65	342	89	700			82	600
99	450	84	500	74	500							87	650			
		89	550	82	550							91	700			

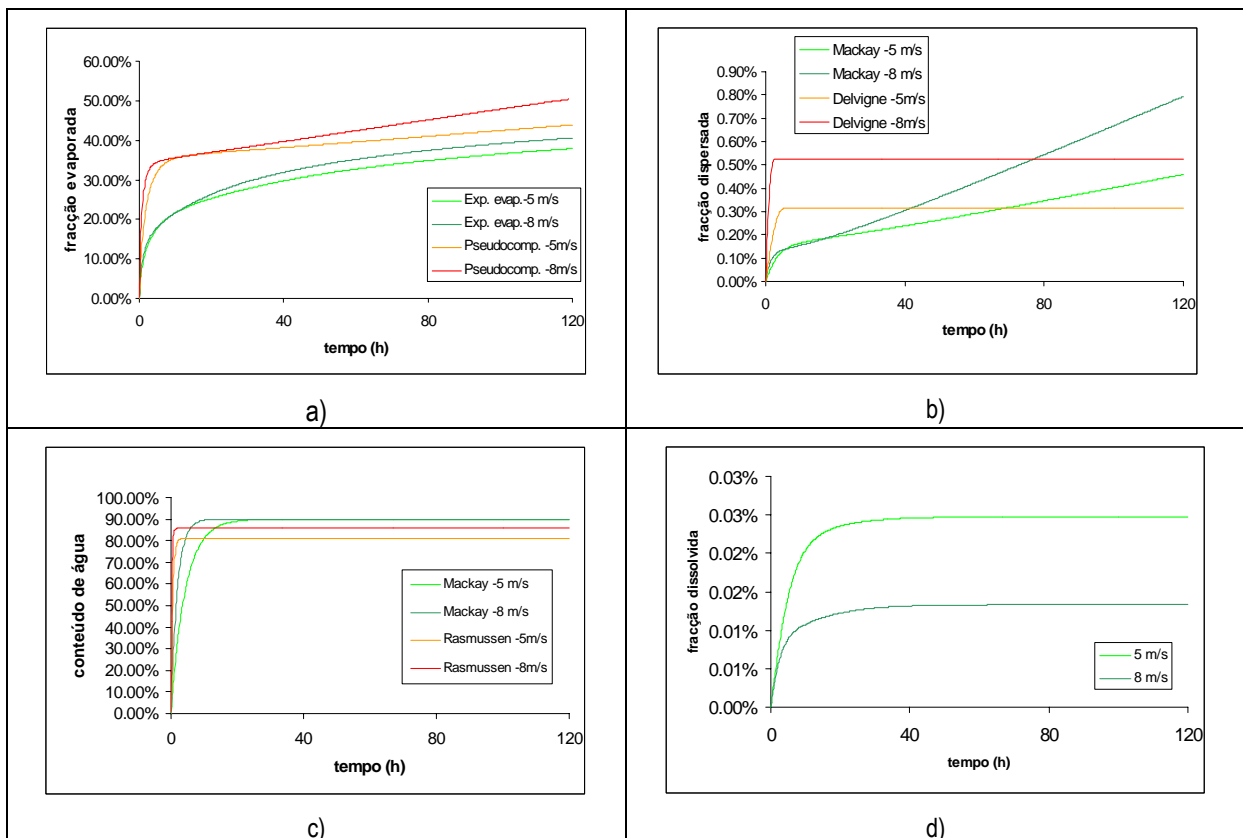
Tabela 3 - Principais propriedades dos óleos testados no modelo

## 10 Variação das Condições Ambientais

### 10.1 EFEITO DO VENTO

O modelo respondeu bem à alteração imposta (ver *Figura 25*), acelerando os processos com o aumento do vento, o que seria previsível. A diminuição da dissolução está relacionada com a maior rapidez na formação de emulsão, no momento em que a dissolução é mais intensa. O único factor que influencia a equação da dissolução é a área de óleo na mancha que contacta com a superfície líquida. Com vento mais forte, há maior incorporação de água na mancha nos primeiros instantes (que coincide com a fase de maior dissolução do óleo), o que resulta numa maior espessura e menor óleo em contacto com a água. A partir de certa altura a fracção de água no óleo é invariável, quer haja vento ou não, contudo nessa fase a dissolução já não é importante. Resulta assim numa menor dissolução com maior vento. Refira-se que a equação não reproduz fielmente a realidade, uma vez que a dissolução aumenta com uma maior agitação marítima (e portanto com o vento), o que não fica demonstrado com a equação utilizada.

O aumento da evaporação com o vento está relacionado com o maior coeficiente de transferência de massa, enquanto que os restantes processos aumentam devido à maior mistura com a coluna de água, resultante de uma maior agitação marítima, relacionada com o maior vento. A mais rápida formação de emulsão com a água origina também um acréscimo mais acelerado na densidade e viscosidade.



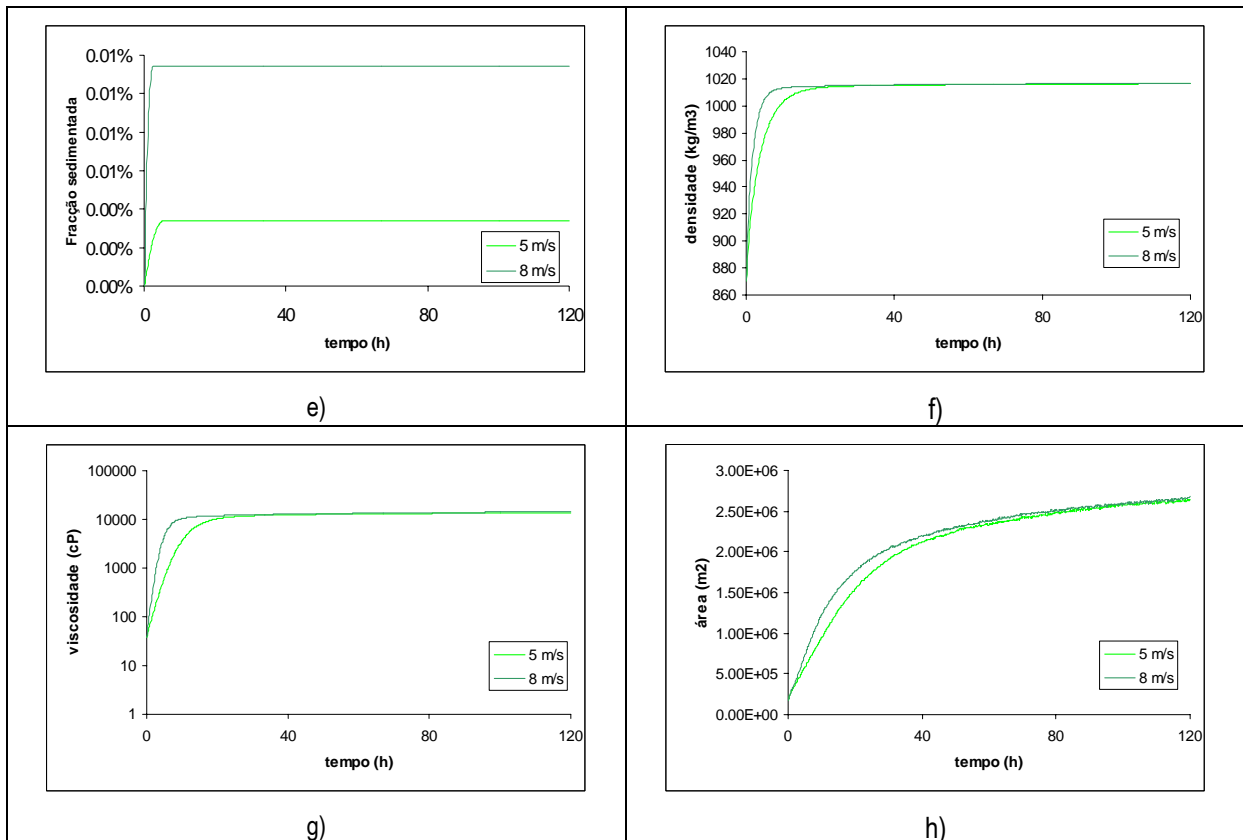
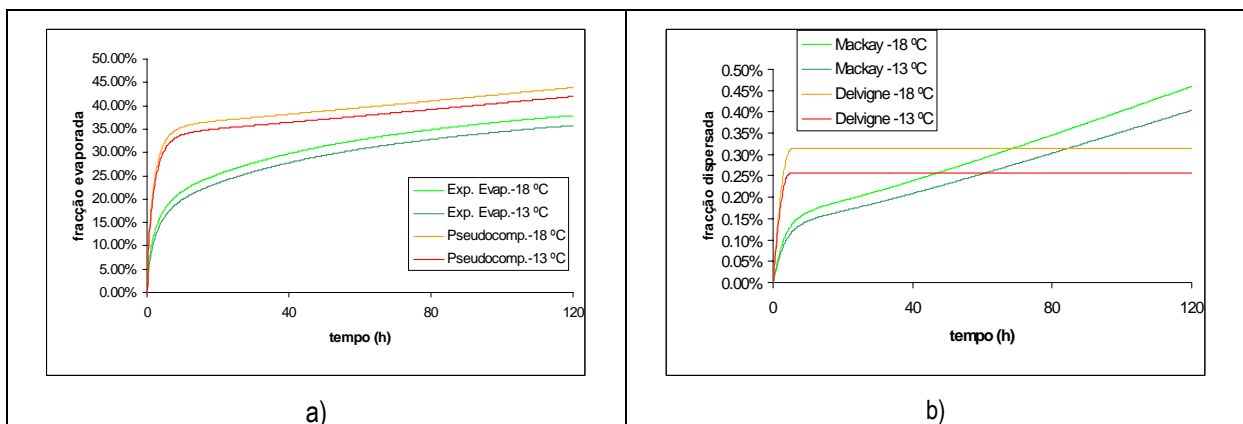


Figura 24 - Evolução dos processos de envelhecimento do crude Kuwait a diferentes velocidades do vento

## 10.2 EFEITO DA TEMPERATURA

O aumento de temperatura tem efeito mais acentuado na diminuição da viscosidade (repercutindo-se numa maior dispersão e numa emulsificação mais rápida), e numa maior facilidade de evaporação. Estes efeitos são reproduzidos pelo modelo (ver *Figura 25*), embora o algoritmo de Mackay para a emulsificação não reproduza a aceleração do processo, uma vez que a equação é independente da viscosidade do óleo (como já foi referido anteriormente). Contudo, as alterações provocadas são, em geral, pouco significativas.



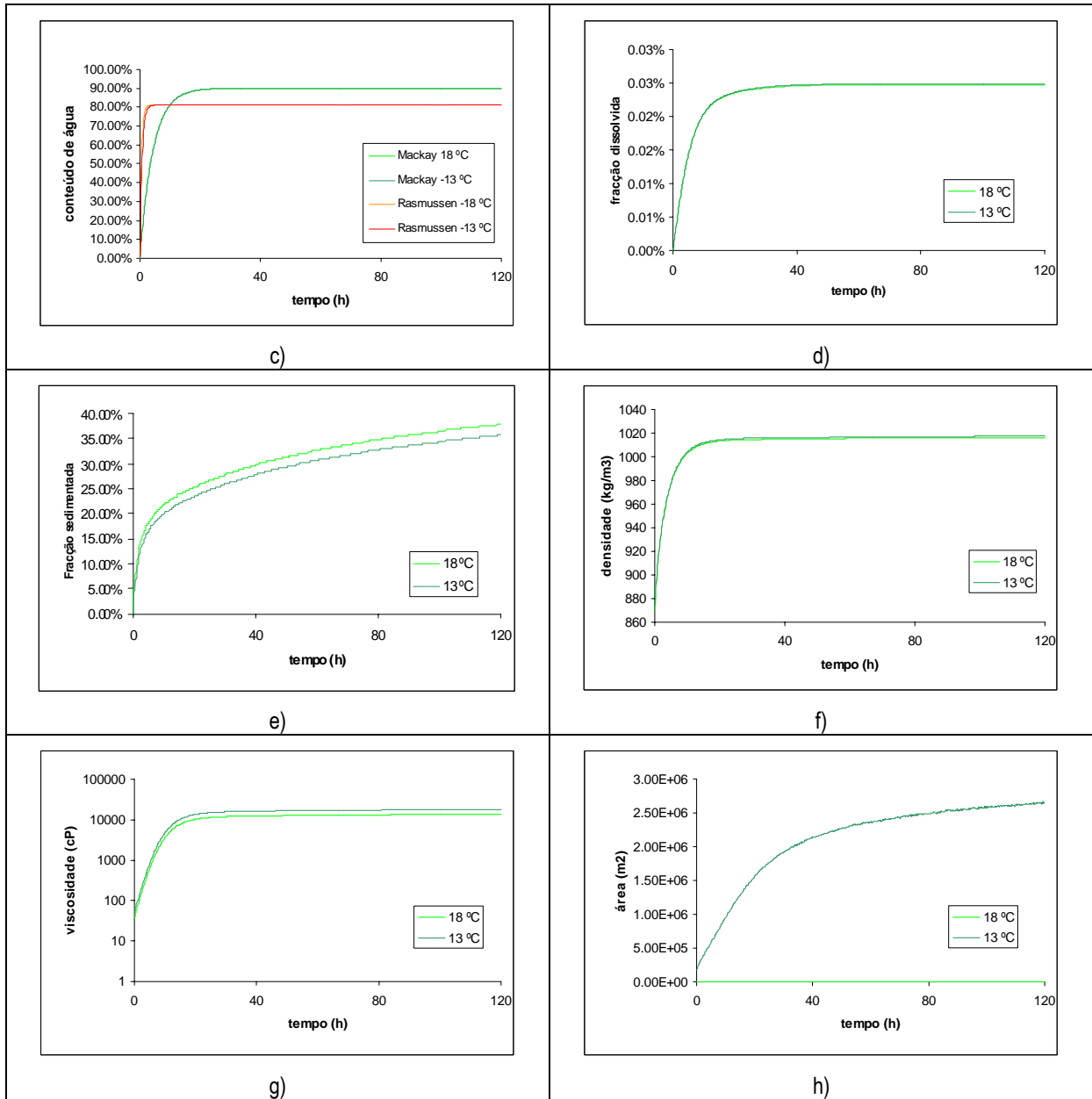


Figura 25 - Evolução dos processos de envelhecimento do crude Kuwait a diferentes temperaturas da água

## 11 Resultados obtidos pelo modelo ADIOS2

Nesta secção apresentam-se os resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 (Automated Data Inquiry for Oil Spills) desenvolvido pela HAZMAT / NOAA, para os óleos testados no relatório principal (Kuwait, Panuke e Statford), nas mesmas condições dos testes realizados nas secções 4.2.1 e 4.2.3.

### 11.1 KUWAIT

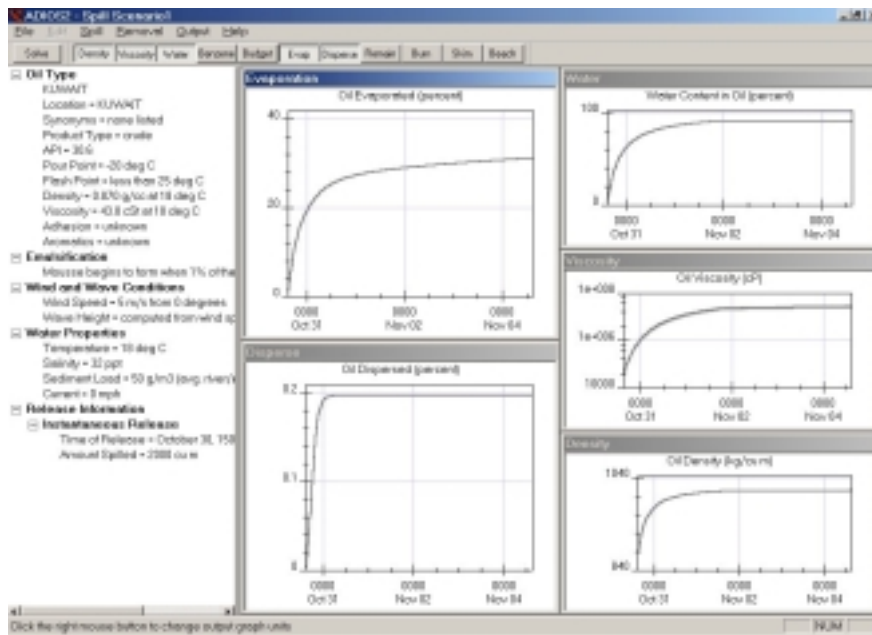


Figura 26 - Resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 para o óleo Kuwait

### 11.2 PANUKE

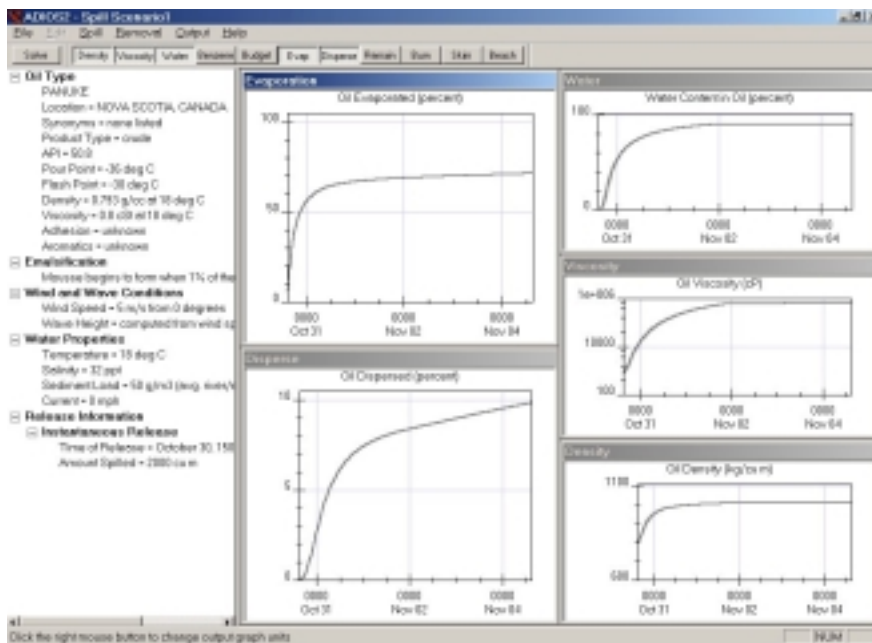


Figura 27 - Resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 para o óleo Panuke

### 11.3 STATFJORD

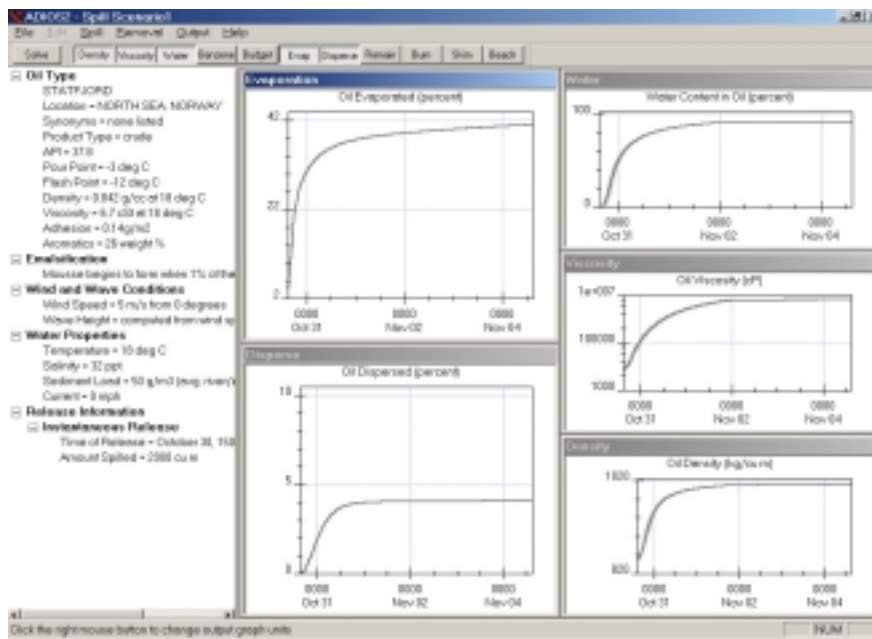


Figura 28 - Resultados produzidos pelo modelo ADIOS 2 para o óleo Statfjord

Em geral, os resultados são bastante semelhantes às previsões correspondentes feitas pelo modelo desenvolvido neste trabalho. As principais diferenças são no andamento da emulsificação (conteúdo de água), e na viscosidade. O processo de emulsificação calculado pelo modelo ADIOS2 apresenta um andamento mais lento, enquanto a viscosidade é bastante mais elevada. Contudo, parece haver um erro na apresentação dos resultados da viscosidade, uma vez que uma viscosidade na ordem dos  $10^6$ - $10^8$  cP é totalmente irrealista. Para unidades em centiStoke este modelo já apresenta valores mais realistas, e bastante próximos daqueles que são calculados pelo modelo desenvolvido.

## 12 Referências

### ***Características e Propriedades dos Hidrocarbonetos***

Costa, Marylena (1999). *Evolução de hidrocarbonetos derramados nas zonas costeiras e estuarinas*. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, Coimbra

NOAA (2000). *ADIOS™ (Automated Data Inquiry for Oil Spills) version 2.0*. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut

Jokuty P., S. Whitticar, Z. Wang, M. Fingas, B. Fieldhouse, P. Lambert, J. Mullin (1999), *Properties of crude oils and oil products*. Manuscript Report EE-165, Environmental Protection Service, Environmental Canada, Ottawa, Ontario

Silva, Sérgio (1997), *Modelação Numérica de Derrames de Hidrocarbonetos no Mar*. Aproximação Lagrangeana do Transporte. Dissertação de Mestrado, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa

### ***Descrição Geral do Sistema MOHID***

Adcroft A.J., Hill C.N., Marshall J., Representation of Topography by Shaved Cells in a Height Coordinate Ocean Model, Mon. Weather Rev. 125 (1997) 2293-2315.

Decyk, V. K., Norton, C. D. e Szymansky, B. - How to Express C++ Concepts in Fortran90.

Duffy, D. - From Chaos to Classes, McGraw-Hill: London, 1995.

Leitão, P. C. (1997) – Modelo de Dispersão Lagrangeano Tridimensional. Tese de Mestrado, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

Miranda, R., Braunschweig, F., Leitão, P. Neves, R., Martins, F. and Santos, A. (2000) – Mohid 2000, A Coastal integrated object oriented model. Hydraulic Engineering Software VIII, WIT Press

Neves, R. J. J. (1985) - Étude Experimentale et Modélisation des Circulations Transitoire et Résiduelle dans l'Estuaire du Sado. Ph. D. Thesis, Univ. Liège

### ***Modelo Hidrodinâmico***

Abbott, M.B., A. Damsgaard and G.S. Rodenhuis, 1973. System 21, Jupiter, a design system for two-dimensional nearly-horizontal flows. J. Hyd. Res., 1, p. 1-28.



Adcroft A.J., Hill C.N., Marshall J., Representation of Topography by Shaved Cells in a Height Coordinate Ocean Model, *Mon. Weather Rev.* 125 (1997) 2293-2315.

Arakawa, A. and V. R. Lamb, 1977: Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. *Methods in Computational Physics*, 17, 174-265.

Arhan, M., Colin de Verdière, A, and L. Mémerly, The Eastern boundary of the subtropical North Atlantic, *J. Phys. Oceanogr.*, 24, 1295-1316, 1994

Blumberg, A.F. and L.H. Kantha, 1985. Open boundary condition for circulation models. *J. of Hydraulic Engineering, ASCE*, 111, 237-2555.

Braunschweig, 2001. Generalização de um modelo de circulação costeira para Albufeiras. Tese de mestrado em Ecologia, Gestão e Modelação dos Recursos Marinhos. Universidade Técnica de Lisboa. Instituto Superior Técnico. Lisboa, 2001.

Chippada S., Dawson C., Wheeler M., A godonov-type finite volume method for the system of shallow water equations, *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 151(01):105-130. 1998

Choi H. B., D. G. Kim e D. H. Kim (1997). A Numerical Tidal Model for the Southeast Asian Seas. *Journal of Korean Society of Coastal and Ocean Engineers*. Vol. 9, No. 2, pp. 63-73, june 1997.

Coelho, H. S., R. J. J. Neves, M. White, P. C. Leitão e A. J. Santos. A circulation model for the western Iberia. *Journal of Marine Systems*. *In press*

Deleersnijder E. e J.-M. Beckers, 1992, On the use of the sigma-coordinate system in regions of large bathymetric variations, *Journal of Marine Systems*, 3, 381-390

Ferziger, J., Perić, M., *Computational methods for fluid dynamics*, Springer, 1995.

Flather, R.A., 1976: A tidal model of the northwestern European continental shelf. *Mem. Soc. R. Sci. Liege, Ser. 6*(10), 141-164.

Hellerman, S. and M. Rosenstein, 1983. Normal monthly wind stress over the world ocean with error estimates. *Journal of Physical Oceanography*, 13, 1,093-1,104.

Kantha, L. H. and C. A. Clayson, 2000. *Numerical Models of Oceans and Oceanic Processes*. International Geophysics Series. Volume 66. Academic Press.

Le Provost, C., F. Lyard, J.M. Molines, M.L. Genco and F. Rabilloud, 1998. A Hydrodynamic Ocean Tide Model Improved by assimilating a satellite altimeter derived dataset. *J. Geophys. Res.* Vol. 103 N. C3, 1998.

Le Provost, C., M.L. Genco, F. Lyard, P. Vincent, and P. Canceil, Spectroscopy of the world ocean tides from a finite element hydrodynamic model, *J. Geophys. Res.*, 99, 24,777-24,797, 1994.

Leendertsee J., Liu S., A three-dimensional turbulent energy model for non-homogeneous estuaries and coastal sea systems, in: Nihoul J. (Eds.), *Hydrodynamics of Estuaries and Fjords*, Elsevier, Amsterdam, 1978 pp. 387-405.

Leendertsee, J.J., 1967. Aspects of a computational model for long water wave propagation. Rand Corporation, Memorandum RH-5299-RR, Santa Monica.

Leendertsee, J.J., 1970. A water quality simulation model for well mixed estuaries and coastal seas. Rand Corporation, Memorandum RM-6230-RC, Santa Monica.

Levitus, S. and., T. P. Boyer, 1994. World Ocean Atlas 1994. Volume 4: NOAA Atlas NESDIS 4, 117pp.

Levitus, S., R. Burgett and T. P. Boyer, 1994. World Ocean Atlas 1994. Volumes 1 and 2: NOAA Atlas NESDIS 3, 99pp.

M. Ruiz-Villarreal<sup>1\*</sup>, P. Montero<sup>1</sup>, J.J. Taboada<sup>1</sup>, R. Prego<sup>2</sup>, P.C. Leitão<sup>3</sup> and V. Pérez-Villar<sup>1</sup>. Hydrodynamic Model Study of the Ria de Pontevedra under Estuarine Conditions. *Estuarine and Coastal Shelf Science*. *In press*.

Martins, F., R. Neves, P. Leitão e A. Silva, 2001. 3D modeling in the Sado estuary using a new generic coordinate approach. *Oceanologica Acta*, 24:S51-S62.

Martinsen, Eivind A. e Harald Engedahl: Implementation and testing of a lateral boundary scheme as an open boundary condition in a barotropic ocean model, *Coastal Engineering*, 11, 603-627, 1987.

Neves R., Leitão P., Braunschweig F., Martins F., Coelho H., Santos A., Miranda R.: The advantage of a generic coordinate approach for ocean modelling. Proceedings of the Eighth International Conference Hydraulic Engineering Software HYDROSOFT 2000, 12-14 Junho 2000, Lisboa.

Neves, R.J.J. e Silva, A.J.R., 1991, An Extension of the Boussinesq Equations to Deep Water - Computer Modelling in Ocean Engng., 1991. A.S. Arcilla, M. Pastor, O.C. Zienkiewicz & B.A. Schrefler, eds. Balkema, Rotterdam, p. 301-309.

Neves, R.J.J., 1985. Étude expérimentale et modélisation mathématique des circulations transitoire et résiduelle dans l'Estuarie du Sado. Ph.D. Thesis, Université de Liège, Belgique.

Paillet, J. and H. Mercier, 1997. An inverse model of the eastern North Atlantic general circulation and thermocline ventilation. *Deep Sea Res.*, 44 (8), 1293-1328.

Palma, E. D. and R. P. Matano, 1998: On the implementation of passive open boundary conditions for a general circulation model: The barotropic mode. *Journal of Geophysical Research*, 103, 1319-1342..

Palma, E. D. and R. P. Matano: On the implementation of passive open boundary conditions for a general circulation model: The three-dimensional case. *Journal of Geophysical Research*, 105, 8605-8627.

Roed, L.P.; Smedstad, O.M. (1984). Open boundary conditions for forced waves in a rotating fluid. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, vol.5, no.2, p. 414-26, 1984.

Ruiz-Villarreal, M., 2000. Parameterization of turbulence in the ocean and application of a 3D baroclinic model to the Ria de Pontevedra Ph.D. Thesis. University of Santiago de Compostela.

Santos, A.J.P. & R.J.J. Neves, 1991. Radiative artificial boundaries in ocean barotropic models. Computer Modelling in Ocean Engng., 1991. A.S. Arcilla, M. Pastor, O.C. Zienkiewicz & B.A. Schrefler, eds. Balkema, Rotterdam, p. 373-383

Santos, A.J.P., 1995. Modelo hidrodinâmico tridimensional de circulação oceânica e estuarina. Tese de doutoramento. Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, 273 pp., Lisboa.

Silva, A.J.R., 1991, Modelação Matemática Não Linear de Ondas de Superfície e de Correntes Litorais, Tese apresentada para obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica. IST, Lisboa.

Stelling, G.S., 1983. On the construction of computational methods for shallow water flow problems. Ph.D. Thesis, Technische Hoogeschool to Delft.

Stevens, D.P. (1991): The Open Boundary Condition in the United Kingdom Fine Resolution Antarctic Model. Journal of Physical Oceanography, 21, pp. 1494-1499.

Trenberth, K. E., W. G. Large and J. G. Olsen, 1990: The mean annual cycle in global wind stress. J. Phys. Oceanogr., 20, 1742-1760.

Vinokur, M., 1989. An analysis of finite-difference and finite-volume formulations of conservation laws. J. Comp. Phys., 81, p. 1-52.

### ***Módulo de Transporte Lagrangeano***

Allen, C. M. (1982). Numerical simulation of contaminant dispersion in estuary flows. Proc. R. Soc. London. A 381, 179-194 (1982).

Bork, I. and Maier-Reimer, E. (1978) - On the Spreading of Power Plant Cooling Water in a Tidal River Applied to the River Elbe. Advances in Water Resources Vol. 1 No.3 1978

Costa, M. V. (1991) - A Three-Dimensional Eulerian-Lagrangian Method for Predicting Plume Dispersion in Natural Waters - Diplôme d'Etudes Approfondies Européen en Modélisation de l'Environnement Marin - ERASMUS.

Fischer, H. B. ; List, E. J. ; Koh, R. C. Y. ; Imberger, J. and Brooks, N. H. (1979) - Mixing in Inland and Coastal Waters. Academic Press, New York, U.S.A., 483p.

Kelsey, A., Allen, C. M., Beven, K. J. and Carling, P. A. (1994) - Particle Tracking Model of Sediment Transport. Mixing and Transport in the Environment. Ed. WILEY, 419-442.

Leitão, P. C. (1997) – Modelo de Dispersão Lagrangeano Tridimensional. Tese de Mestrado, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

Monteiro, A. J. , Neves, R. J. and Sousa, E. R. (1992) - Modelling Transport and Dispersion of Effluent Outfalls. Water Science and Technology WSTED4, Vol. 25, No. 9, p 143-154, 1992.

Neves, R. J. J. (1985) - Étude Experimentale et Modélisation des Circulations Transitoire et Résiduelle dans l'Estuaire du Sado. Ph. D. Thesis, Univ. Liège

Neves, R. J. J. and Martins, F. A. (1996) - Modelação Lagrangeana dos processos de transporte na Ria Formosa. 5a Conferência Nacional sobre a Qualidade do Ambiente, Aveiro.

Mansur, L. , Price D. M. (1992). Oil-RW: A mathematical model for predicting oil spills trajectory and weathering. Hydraulic and Environmental Modelling: Coastal Waters. Proceedings of the Second International Conference on Hydraulic and Environmental Modelling of Coastal, Estuarine and River Waters, Volume 1, pp. 201 - 212.

Monteiro, A. J. (1995) - Dispersão de Efluentes Através de Exutores Submarinos. Uma contribuição para a modelação matemática. Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico.

Portela, L. (1996) - Modelação matemática de processos hidrodinâmicos e de qualidade da água no Estuário do Tejo. Dissertação para obtenção do grau de Doutor em engenharia do Ambiente, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.

Rodrigues, V., Neves, R. J. J. & Miranda, R (1996) - Modelação ecológica e da qualidade da água em zonas costeiras. 5a Conferência Nacional sobre a Qualidade do Ambiente, Aveiro.

Shiau, B. (1991). Computer modelling of oil pollutants transport on the water. Computer modelling in Ocean Engineering: Vol. 91, pp. 467-475.

Sullivan, P. J. (1971). Longitudinal dispersion within a two-dimensional turbulent shear flow. Journal Fluid Mech., vol. 49, part 3, pp. 551-576 (1971).

Tennekes H. e Lumley (1972) - A First Course in Turbulence. Edited by MIT Press.

Woods, J. D. and Onken, R. (1982) – Diurnal variation and primary production in the ocean – preliminary results of a Lagrangian ensemble model. Journal of Plankton Research, 4, 3.

Miranda, R., R. Neves, H. Coelho, H. Martins, P. C. Leitão and A. Santos, 1999: Transport and Mixing Simulation Along the Continental Shelf Edge Using a Lagrangian Approach, Bol. Inst. Esp. Oceanogr., 15,39-60

### ***Propriedades dos Produtos Petrolíferos Utilizados no Modelo:***

NOAA (2000). *ADIOS™ (Automated Data Inquiry for Oil Spills) version 2.0*. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut

Jokuty P., S. Whiticar, Z. Wang, M. Fingas, B. Fieldhouse, P. Lambert, J. Mullin (1999), *Properties of crude oils and oil products*. Manuscript Report EE-165, Environmental Protection Service, Environmental Canada, Ottawa, Ontario