ANEXO II

Modelos utilizados



DEFINIÇÃO DE ÂMBITO DO ESTUDO DE IMPACTE AMBIENTAL DA CENTRAL DE CICLO COMBINADO DO SUL



ANEXO IIA

Modelização Hidrodinâmica - Sistema de Modelos MOHID



DEFINIÇÃO DE ÂMBITO DO ESTUDO DE IMPACTE AMBIENTAL DA CENTRAL DE CICLO COMBINADO DO SUL



SISTEMA DE MODELOS

BREVE DESCRIÇÃO

1 - O SISTEMA DE MODELOS MOHID

O sistema de modelos MOHID, originalmente desenvolvido no Instituto Superior Técnico, compreende um conjunto de módulos capazes de, para além da hidrodinâmica, simular fenómenos de dispersão (abordagens lagrangeana e euleriana), qualidade da água e transporte de sedimentos (coesivos e não coesivos). Todos estes módulos apresentam a particularidade de poderem ser utilizados integrados nos códigos MOHID2D ou MOHID3D ou trabalharem isoladamente, utilizando neste caso valores de correntes fornecidos por ficheiros externos.

Entre os módulos que compõem actualmente o sistema de modelos MOHID podem salientar-se:

• Módulo hidrodinâmico bidimensional - MOHID2D

MOHID2D é um modelo hidrodinâmico bidimensional, integrado na vertical. Embora se trate de um modelo 2D permite a consideração simultânea de ramos 1D para a simulação de escoamentos em rios por exemplo. Este modelo resolve as equações para águas pouco profundas (*shallow water equations*), usando um algoritmo semi - implícito, baseado em diferenças finitas, e permite a simulação de escoamentos produzidos por diferentes agentes forçadores como sejam a maré, o vento ou as ondas produzidas pelo vento.

Este modelo pode ser utilizado resolvendo as equações de Saint-Vennant (pressão hidrostática) ou as equações de Boussinesq (pressão não hidrostática). A primeira opção é válida no caso de escoamentos de ondas longas (e.g. maré) enquanto a segunda opção é necessária para a simulação de ondas curtas (e.g. ondas de vento). No caso deste último módulo (equações de Boussinesq) a versão das equações que é resolvida apresenta uma extensão a águas profundas que permite a propagação de ondas de vento desde águas profundas até á costa e inclui a simulação do processo de rebentação.

Módulo hidrodinâmico tridimensional - MOHID3D

MOHID3D é um modelo hidrodinâmico tridimensional que tem como hipóteses básicas as aproximações hidrostática e de Boussinesq. A discretização espacial é efectuada com base numa coordenada genérica na vertical (incluindo a coordenada sigma e a cartesiana) e numa malha descentrada na horizontal. O esquema temporal é do tipo semi-implícito (Santos & Neves, 1991, Santos, 1995). Adicionalmente às equações de momento e de conservação da massa, o modelo inclui uma equação de estado que relaciona a temperatura e a salinidade com a densidade. O modelo inclui ainda um termo de pressão baroclínico que lhe permite considerar os efeitos da densidade no escoamento. Este é calculado num referencial cartesiano independentemente da discretização vertical adoptada.

• Módulo de turbulência

O módulo de turbulência no modelo MOHID é baseado no módulo de turbulência do modelo GOTM (General Turbulence Ocean Model, http://www.gotm.net). 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 principio de viscosidade turbulenta, que nos 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- ϵ e Mellor-Yamada) são os que descrevem mais realisticamente a física da 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-ɛ e Mellor-Yamada mais evoluídos no modelo GOTM (e portanto no modelo 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.

• Módulo de transporte euleriano

Este módulo permite calcular evolução de uma propriedade caracterizada por um gradiente suave. Resolve explicitamente os termos advectivos e difusivos horizontais e implicitamente os termos advectivos e difusivos verticais, podendo o termo advectivo ser resolvido recorrendo a um dos seguintes tipos de discretização: diferenças centradas, *upwind* e QUICK.

Este módulo pode ser acoplado quer ao módulo bidimensional quer ao módulo tridimensional.

Este módulo é responsável pela evolução, relativa a um referencial euleriano, de todas as propriedades físicas e biogeoquímicas da água. Neste momento é possível simular a evolução de uma extensa lista de propriedades: temperatura, salinidade, sedimentos finos, areias, fitoplancton, zooplancton, peixes, bacterias, larvas, fósforo orgânico, fósforo inorgânico, azoto orgânico particulado, azoto orgânico dissolvido refractário, azoto orgânico dissolvido não-refractário, amónia, nitrato, nitrito, oxigénio, arsénio particulado, arsénio dissolvido, CBO (Carência Bioquímica de Oxigénio).

No caso do modelo 3D baroclínico, este módulo de transporte é utilizado por defeito para calcular a evolução no espaço e no tempo da salinidade e da temperatura uma vez que estes valores são necessários para a determinação do valor de densidade em cada ponto do modelo.

A advecção e a difusão são processos comuns a todas estas propriedades, no entanto existem outros processos específicos de cada propriedade. Destes processos podem salientar-se os seguintes:

• Transporte de sedimentos finos

A simulação do transporte de sedimentos finos é efectuada com base no módulo de transporte euleriano, com formulações específicas para a velocidade de queda, para as trocas com o fundo e para a floculação. A representação do fenómenos de floculação e erosão/sedimentação dos sedimentos é efectuada

com base em formulações empíricas que devem ser calibradas com base em medidas locais

• Transporte de areias

O módulo de transporte de areias, permite seguir a evolução da batimetria em estuários ou zonas costeiras sujeitas à acção de ondas, correntes ou à acção combinada de ondas e correntes.

Para uma dada batimetria, tipo de sedimentos e correntes locais, o modelo calcula as taxas de transporte de sedimentos de acordo com uma de diversas fórmulas de transporte ao dispôr do utilizador (ex. Meyer-Peter y Muller, Baillard, Bijker, Van Rijn, Ackers & White). É assim possível avaliar de forma contínua a evolução da batimetria local bem como os respectivos volumes de erosão/sedimentação.

Os sedimentos são assumidos como não coesivos e podem ser considerados diferentes diâmetros ao longo da zona de interesse.

• Qualidade da Água

O modelo ecológico e de qualidade da água incorporado no sistema MOHID é um modelo ecológico adimensional adaptado do WASP (EPA, 1985), o que permite obter, de um modo flexível e eficiente, o seu acoplamento a um modelo hidrodinâmico, seja na formulação Euleriana ou Lagrangeana. O modelo de qualidade da água pode simular os ciclos do Azoto e do Fósforo, as concentrações de Oxigénio Dissolvido e CBO e as populações de Fito e Zooplâncton.

Módulo de transporte lagrangeano

O módulo de transporte lagrangeano do sistema do modelos MOHID tem diversas aplicações, possibilitando a simulação do movimento de traçadores com determinadas propriedades, com base num campo de velocidades calculado com os módulos hidrodinâmicos 2D ou 3D.

Os traçadores podem ser utilizados para simular os mais diversos tipos de fenómenos como sejam, por exemplo, a dispersão de efluentes, o deslocamento de manchas de resultantes de acidentes, a qualidade da água, fenómenos ecológicos com simulação em grandes caixas, etc.

O módulo de transporte lagrangeano apresenta-se como uma ferramenta privilegiada de integração em estudos de processos multi-disciplinares com objectivo de compreender fenómenos que tenham uma vertente hidrodinâmica, química e biológica

• Interfaces

Para facilitar a utilização do sistema MOHID foi desenvolvida uma interface gráfica num ambiente *Windows*. Esta interface permite ao utilizador gerir os dados de entrada do sistema MOHID, executar o programa e analisar os resultados produzidos por ele.

No texto que se segue apresenta-se uma descrição sucinta das características dos diversos módulos atrás referidos.

2 - DESCRIÇÃO DO MÓDULO MOHID2D

2.1 - Considerações Gerais

MOHID é um modelo hidrodinâmico bi-dimensional, integrado na vertical originalmente desenvolvido no Instituto Superior Técnico (IST), Lisboa, Portugal que resolve as equações para águas pouco profundas, que resultam da integração na vertical das equações de Navier-Stokes.

Este modelo possui um módulo que resolve a aproximação com pressão hidrostática (equações de Saint-Venant) e outro que resolve a aproximação com pressão não hidrostática (equações de Boussinesq). O primeiro é aplicável a escoamentos de ondas longas (e.g. propagação da maré) e o segundo a escoamentos de ondas mais curtas (e.g. propagação de ondas de vento).

O módulo de propagação de ondas de vento possui ainda uma aproximação para águas profundas que permite aplicar o modelo para propagar ondas desde grandes a pequenas profundidades.

Para além disso o modelo MOHID possui ainda um conjunto de outros módulos que lhe permitem lidar com problemas de dispersão, qualidade da água e transporte de sedimentos. Para além disso, embora seja um modelo bi-dimensional, pode também incluir troços uni-dimensionais.

2.2 - Equações

As equações resolvidas no modelo MOHID referem-se às equações para águas pouco profundas para um fluido homogéneo com densidade constante:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial Hu}{\partial x} + \frac{\partial Hv}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{u}{t} + u \frac{\partial}{\partial x} \frac{u}{x} + v \frac{\partial}{\partial y} \frac{u}{y} - fv = -g \frac{\partial}{\partial x} \frac{\xi}{x} + \frac{h}{2} \left[\frac{\partial^{3}(hu)}{\partial x^{2} \partial t} + \frac{\partial^{3}(hv)}{\partial x \partial y \partial t} \right]$$
$$- \frac{h^{2}}{6} \left(\frac{\partial^{3}u}{\partial x^{2} \partial t} + \frac{\partial^{3}v}{\partial x \partial y \partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial}{\partial y} \right) - \frac{c_{b}}{H} |u| u + \frac{c_{s}}{H} |w| w_{x}$$
$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{v}{t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \frac{v}{t} + fu = -g \frac{\partial}{\partial y} \frac{\xi}{y} + \frac{h}{2} \left[\frac{\partial^{3}(hv)}{\partial y^{2} \partial t} + \frac{\partial^{3}(hu)}{\partial x \partial y \partial t} \right]$$
$$- \frac{h^{2}}{6} \left(\frac{\partial^{3}v}{\partial y^{2} \partial t} + \frac{\partial^{3}u}{\partial x \partial y \partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial}{\partial y} \right) - \frac{c_{b}}{H} |u| v + \frac{c_{s}}{H} |w| w_{x}$$

sendo t: tempo, (x,y): coordenadas cartesianas no plano horizontal; ξ : elevação da superfície livre acima do nível médio; H: Altura da coluna de água (desde o fundo até à superfície livre); (u,v): médias verticais das componentes horizontais da velocidade; f: parâmetro de Coriolis; g: aceleração da gravidade; μ : média vertical da viscosidade turbulenta; c_b:parâmetro da tensão de corte no fundo; c_s: parâmetro da tensão de corte na superfície; (w_x,w_y): componentes horizontais da velocidade do vento.

No caso da simulação do escoamento da maré em estuários e rios, o domínio do modelo pode ser estendido até ao limite da propagação da maré usando modelos unidimensionais. As equações do modelo uni-dimensional, obtidas por integração numa secção transversal, são:

$$B \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{Q}{A} \frac{\partial Q}{\partial x} = -g A \frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{c_s}{HA} |Q| Q + c_b B |w| w_x$$

sendo B: largura do canal; Q: caudal; A: área da secção transversal.

2.3 - Extensão das equações a águas profundas

A incapacidade da forma tradicional das equações de Boussinesq para lidarem com problemas de propagação de ondas em águas intermédias e profundas, constitui uma limitação na aplicação dos modelos baseados nestas equações a muitas situações para as quais poderiam constituir uma ferramenta importante.

A ultrapassagem desta limitação resulta na possibilidade de utilização de um mesmo modelo para a propagação das ondas desde águas profundas até águas pouco profundas, garantindo a consideração dos efeitos não lineares e dispersivos desta última zona, não contemplados noutros modelos usualmente utilizados nestas situações. Com o objectivo de obviar esta limitação, durante os últimos anos foram propostas novas formas das equações podendo referir-se as aproximações propostas por Madsen e Sorensen (1990), Neves e Silva (1991), Nwogu (1993) e Wei et al (1994) entre outros.

No presente caso, o modelo MOHID2D permite lidar com o problema da simulação da propagação de agitação em águas profundas utilizando tanto a abordagem proposta por Nwogu (1993) como a proposta por Neves e Silva (1991). Embora esta última só seja válida para ondas monocromáticas apresenta a vantagem de, nos casos em que é aplicável, necessitar de tempos de cálculo inferiores.

A abordagem proposta por Neves e Silva baseia-se num conceito de ajuste da relação de dispersão para águas profundas à relação de dispersão que resulta da teoria de Stokes. Considerando que, em termos gerais, a relação de dispersão pode ser escrita na forma,

$$\frac{C^2}{gh} = \frac{1+Bk^2h^2}{1+\left(B+\frac{1}{3}\right)k^2h^2}$$

sendo **B** um coeficiente variável segundo a forma das equações considerada.

as equações de Boussinesq terão uma relação de dispersão que pode ser apresentada na forma:

$$\frac{C^2}{gh} = \frac{1}{1 + \left(B + \frac{1}{3}\right)k^2 {h'}^2}$$

sendo h' o valor da profundidade até onde se fazem sentir as velocidades orbitais da onda.

Uma vez que a base deste método consiste em obrigar as equações de Boussinesq a verificarem a relação de dispersão da teoria de Stokes em àguas profundas, os valores de h' podem ser obtidos igualando a relação de dispersão da teoria de Stokes à relação de dispersão anterior por forma a obter:

h' =
$$\sqrt{\frac{3 h}{k \tanh(k h)} - \frac{3}{k^2}}$$

Substituindo o valor de h por h' nos termos de boussinesq das equações apresentadas anteriormente, obtém-se uma nova forma das equações a qual é apropriada para aplicações tanto em águas pouco profundas como em águas profundas. No primeiro caso a relação h'/h tende para 1 (e portanto para o resultado da forma clássica das equações de boussinesq) enquanto que no segundo caso assume valores inferiores a 1. As equações de conservação de momento podem então escrever-se na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{u}{t} + u \frac{\partial}{\partial x} \frac{u}{x} + v \frac{\partial}{\partial y} \frac{u}{y} - fv = -g \frac{\partial}{\partial x} \frac{\xi}{x} + \frac{h'}{2} \left[\frac{\partial^{3}(h'u)}{\partial x^{2}\partial t} + \frac{\partial}{\partial x\partial y\partial t} \frac{(h'v)}{\partial x\partial y\partial t} \right]$$
$$- \frac{h'^{2}}{6} \left(\frac{\partial^{3}u}{\partial x^{2}\partial t} + \frac{\partial^{3}v}{\partial x\partial y\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial}{\partial y} \right) - \frac{c_{b}}{H} |u| u + \frac{c_{s}}{H} |w| w_{x}$$
$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{v}{t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \frac{v}{t} + fu = -g \frac{\partial}{\partial y} \frac{\xi}{y} + \frac{h'}{2} \left[\frac{\partial}{\partial y^{2}\partial t} + \frac{\partial}{\partial x\partial y\partial t} \right]$$
$$- \frac{h'^{2}}{6} \left(\frac{\partial^{3}v}{\partial y^{2}\partial t} + \frac{\partial^{3}u}{\partial x\partial y\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial}{\partial y} \right) - \frac{c_{b}}{H} |u| v + \frac{c_{s}}{H} |w| w_{x}$$

No caso da propagação de ondas irregulares, a dependência de h' do número de onda impede a utilização da aproximação anterior. Nestes casos a abordagem proposta por Nwogu é então adoptada. Esta forma das equações é actualmente considerada como uma das mais evoluídas no que respeita ao tratamento deste tipo de problemas.

Nesta forma, as equações são escritas em função da velocidade horizontal a uma profundidade arbitrária z , assumindo as equações a forma:

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\xi}{t} &+ \frac{\partial}{\partial x} \frac{Hu}{x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{Hv}{y} + \nabla \left[\left(\frac{z_{\alpha}}{2} - \frac{h^2}{6} \right) h \nabla \left(\nabla u \right) + \left(z_{\alpha} + \frac{h}{2} \right) h \nabla \left(\nabla hu \right) \right] \\ \frac{\partial}{\partial t} \frac{u}{t} + u \frac{\partial}{\partial x} \frac{u}{x} + u \frac{\partial}{\partial y} \frac{v}{y} - f v = -g \frac{\partial}{\partial x} \frac{\xi}{x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial}{\partial x} \frac{u}{x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial}{\partial y} \frac{u}{y} \right) - \frac{c_b}{H} |u| u + \frac{c_s}{H} |w| w_x \\ &- z_{\alpha} \left[\left(\frac{\partial^3 (hu)}{\partial x^2 \partial t} + \frac{\partial^3 (hv)}{\partial x \partial y \partial t} \right) + \frac{z_{\alpha}}{2} \left(\frac{\partial^3 (u)}{\partial x^2 \partial t} + \frac{\partial^3 (v)}{\partial x \partial y \partial t} \right) \right] \\ \frac{\partial}{\partial t} \frac{v}{t} + u \frac{\partial}{\partial x} \frac{v}{x} + v \frac{\partial}{\partial y} \frac{v}{y} + f u = -g \frac{\partial}{\partial t} \frac{\xi}{y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial}{\partial x} \frac{v}{y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial}{\partial y} \frac{v}{y} \right) - \frac{c_b}{H} |v| v + \frac{c_s}{H} |w| w_y \\ &- z_{\alpha} \left[\left(\frac{\partial^3 (hv)}{\partial y^2 \partial t} + \frac{\partial^3 (hu)}{\partial x \partial y \partial t} \right) + \frac{z_{\alpha}}{2} \left(\frac{\partial^3 (v)}{\partial y^2 \partial t} + \frac{\partial^3 (u)}{\partial x \partial y \partial t} \right) \right] \end{split}$$

representando (u,v) neste caso as componentes horizontais da velocidade a uma profundidade arbitrária z .evo o perador gradiente ($\partial/\partial x; \partial/\partial y$)

2.4 - Simulação do processo de rebentação

O processo de rebentação das ondas é simulado seguindo a aproximação proposta por Heitner e Housner (1970), Zelt (1991) e Wei e Kirby (1996) segundo a qual o efeito

da rebentação é simulado através da adição de um termo de dissipação de energia à equação de conservação de momento:

$$F_{br} = \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\upsilon_{b}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\upsilon_{b}\frac{\partial u}{\partial y}\right), \frac{\partial}{\partial x}\left(\upsilon_{b}\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\upsilon_{b}\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right]$$

representando _b o coeficiente de viscosidade turbolenta defenido como:

$$\upsilon_b = -\mathbf{B}\alpha^2 \mathbf{h}^2 \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}}, \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{y}} \right)$$

sendo B um coeficiente relacionado com as propriedades locais das ondas e o correspondente valor critico para a rebentação ocorrer. O coeficiente é uma parâmetro relacionado com o comprimento de mistura, sendo o seu valor determinado empiricamente.

No modelo MOHID2D é seguida a proposta de Wei e Kirby (1996) segundo a qual o valor de é assumido como constante e igual a 2.

A definição do valor critico do gradiente de velocidade u* segue a proposta de Zelt (1991) segundo a qual $u^* = -0.3\sqrt{g/h}$ e o coeficiente B é dado por:

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & se \quad \nabla . \mathbf{u} \le 2 \mathbf{u}^* \\ \frac{\nabla \mathbf{u}}{\mathbf{u}^*} - 1 \end{pmatrix} \quad se \quad 2 \mathbf{u}^* < \nabla . \mathbf{u} \le \mathbf{u}^* \\ 0 & se \quad \nabla . \mathbf{u} > \mathbf{u}^* \end{cases} \right\}$$

2.5 - Solução numérica

As equação diferenciais às derivadas parciais são resolvidas com diferenças finitas, utilizando o método ADI (*Alternating Direction Implicit*) que tem precisão de segunda ordem no espaço e no tempo.

A discretização temporal escolhida resolve 6 equações de diferenças finitas em cada passo no tempo. Esta forma de discretização tem melhores propriedades do que as que resolvem apenas 4 equações, nomeadamente nas zonas entre marés.

Em cada meio passo de tempo, é efectuada a inversão de uma matriz tridiagonal utilizando o algoritmo de Thomas.

2.6 - Condições de fronteira e outros dados

Em geral, na fronteira com o oceano impõe-se a elevação da superfície livre, dada pelas componentes de maré escolhidas ou pela equação da onda que se pretende

(solitária, sinusoidal, cnoidal, irregular). Nas fronteiras fluviais (no caso da maré) é imposto o caudal. É habitualmente conveniente utilizar modelos 1D nos troços fluviais mais importantes e até à zona de influência da maré.

O modelo está ainda preparado para correr sub-modelos com uma resolução espacial mais apertada, se tal for necessário, numa área específica do modelo global. O cálculo do sub-modelo é efectuado utilizando na sua fronteira resultados interpolados do modelo global, que é corrido previamente.

3 - DESCRIÇÃO DO MÓDULO MOHID3D

3.1 - Características Gerais

O desenvolvimento deste modelo iniciou-se em 1987, tendo vindo a ser objecto de sucessivos aperfeiçoamentos na sequência da sua aplicação a diferentes projectos. Actualmente, pode cotar-se como um dos mais evoluídos entre os modelos deste tipo existentes, nomeadamente pelas suas características inovadoras no que respeita à discretização vertical.

A discretização vertical é efectuada com base numa coordenada genérica que permite a divisão vertical do domínio em zonas com tipos de coordenada diferentes. Isto constitui uma comprovada vantagem do MOHID2000 tanto mais que muito recentemente foi apresentado um protótipo do POM (Princeton Ocean Model, Blumberg e Mellor, 1987), que actualmente é um modelo de coordenada sigma e que no futuro permitirá também a generalização da coordenada vertical (Mellor et al. 2000).Na horizontal é usado uma malha descentrada clássica. O esquema temporal é do tipo semi-implicito (Santos & Neves, 1991, Santos, 1995).

O transporte horizontal e o termo de Coriolis são resolvidos explicitamente, enquanto o termo de pressão e o transporte vertical são resolvidos com recurso a um algoritmo implícito.

As equações de balanço da quantidade de movimento nas três direcções espaciais e da continuidade em coordenadas cartesianas podem escrever-se:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - fv = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (A_H \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (A_H \frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (A_V \frac{\partial u}{\partial z})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + fu = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} (A_H \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (A_H \frac{\partial v}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (A_V \frac{\partial v}{\partial z})$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

sendo: *t* - tempo; *u*,*v*,*w* - componentes da velocidade; *f* - parâmetro de Coriolis; *p* - pressão; $\tilde{}$ - densidade da água; *g* - aceleração da gravidade; *A*_H e *A*_V - viscosidade cinemática turbulenta na horizontal e vertical.

Como condição de fronteira no fundo é imposta uma tensão de corte:

$$\tau = \xi c_d \left| \overline{u}_+ \right| \overline{u}_+$$
$$c_d = k^2 \left(\ln \frac{z_+}{z_0} \right)^{-2}$$

sendo: u_+ - vector de velocidade horizontal nas direcções *x*, *y* direction a uma distancia z_+ acima do fundo; c_d - coeficiente de atrito do fundo; *k* - constante de Von Karman; z_0 - rugosidade.

Como condição de fronteira à superfície pode, opcionalmente, ser imposta uma tensão de corte devido ao vento, t_w , determinada empiricamente a partir da velocidade local do vento. Para determinar a tensão do vento várias expressões baseadas na parametrização em bloco foram propostas. Presentemente o modelo usa a expressão proposta por Large & Pond (1981)

 $\tau_{\omega} = \rho_0 c_{dw} \left| \overline{u} \right| \left| \overline{u} \right|$

sendo C_{dw} , o coeficiente de transferência de quantidade de movimento dado por:

 $C_{dw} = (0.46 + 0.069\overline{u})10^{-3}$ se $11m/s \le \overline{u} \le 19m/s$ $C_{dw} = 1.14x10^{-3}$ se $\overline{u} \le 11m/s$

onde \overline{u} representa a velocidade do vento e $_{0}$ a densidade de referência da água..

3.1.1 - Coordenada Vertical Genérica

Na modelação de escoamentos geofísicos têm sido utilizados vários tipos de discretização vertical do domínio real (e.g. Coordenadas Cartesianas, Sigma, Isopícnicas, Lagrangeanas, Células cortadas, etc.) com os objectivos gerais de descrever de forma adequada o fundo, conservar a resolução vertical em todo o domínio e melhorar as propriedades numéricas dos esquemas de cálculo utilizados (Beckers, 1991), (Oberhuber, 1986). Estas discretizações são geralmente implementadas através de uma transformação vertical de coordenadas.

Nestas transformações o domínio real e os volumes de controlo, de forma usualmente complexa, são transformados num domínio e células de cálculo de forma simples, geralmente cartesianas rectangulares onde as equações e as condições fronteira são facilmente implementadas. Este tipo de abordagem, apesar das vantagens apontadas possui os seguintes inconvenientes:

- As equações no domínio transformado devem incluir termos adicionais usualmente não lineares- como o jacobiano da transformação de coordenadas, tornando-se por esse motivo de resolução mais complexa.
- Os processos físicos relacionados com a geometria surgem distorcidos no domínio transformado sendo de difícil interpretação (e.g. interpolação do termo baroclínico).
- A transformação de coordenadas pode produzir singularidades em alguns pontos do domínio (e.g. zonas de descobertura nas coordenadas sigma ou camadas de espessura nula nas coordenadas Isopícnicas.

A abordagem adoptada neste modelo foi a de permanecer no domínio real resolvendo as equações pelo método do volume de controlo. Utilizam-se para isso células de cálculo rectangulares na horizontal mas com os vértices livres de se mover no sentido vertical. Com esta estratégia torna-se simples implementar qualquer tipo de coordenada vertical actuando unicamente sobre a geometria das células de cálculo, sem necessidade de alterar as equações hidrodinâmicas que desta forma não incluem termos relacionados com a forma da malha. Os processos físicos tornam-se também mais perceptíveis uma vez que tudo se passa no domínio real.

Este tipo de implementação permite também utilizar simultaneamente vários tipos de coordenadas em zonas distintas do domínio de cálculo (zonas estas denominadas subdomínios). Desta forma adapta-se facilmente a malha às exigências específicas de cada subdomínio, sendo também facilmente resolvidos os problemas com as singularidades atrás referidos.

A malha adoptada é uma malha descentrada do tipo C de Arakawa sendo as células de cálculo hexaedros. Os vértices destes hexaedros são coplanares na vertical definindo por isso de forma unívoca os planos que compõem as faces verticais. As faces superior e inferior de cada hexaedro são definidas pelos quatro vértices superiores e inferiores respectivamente. No entanto estes vértices não são coplanares na horizontal, não definindo por isso univocamente uma superfície. Várias superfícies podem ser adoptadas neste caso desde que sejam usadas de forma consistente por todas as células. No modelo optou-se por uma superfície composta por quatro triângulos definidos pelo centro da superfície em questão (média vectorial das posições dos vértices) e por cada uma das quatro arestas. Como a superfície é composta sectorialmente por planos torna-se fácil o cálculo do volume da célula assim como a determinação dos fluxos por essa superfície.



Figura 1 - Esquema de uma célula no sistema de coordenadas verticais genéricas

Uma descrição detalhada deste modelo pode ser encontrada em Martins *et al.* (1998) e Martins *et al.* (*in press*). O modelo foi usado nesta configuração em diversos estudos (Taboada *et al.*, 1998; Coelho *et al.*, 1999; Miranda *et al.*, 1999; Coelho *et al.*, submetido ao *Journal of Marine Systems*).

3.2 - Componente Baroclínica

O modelo calcula o termo de pressão baroclínica tendo por base as hipóteses hidrostática e a aproximação de Boussinesq. Este termo é importante nos casos em que exista gradientes de densidade significativos. A densidade (ρ) é calculada a partir de uma equação de estado função da salinidade e temperatura. A evolução destas duas propriedades é calculada pelo módulo de transporte Euleriano.



sendo: S e T a salinidade e temperatura

Uma vez que a salinidade e temperatura podem ter um efeito directo sobre a hidrodinâmica é necessário ter alguns cuidados especiais no calculo do seu transporte em especial na imposição das condições de fronteira. Na fronteira aberta é resolvida uma equação de advecção com uma discretização upwind. Quando o escoamento é do exterior para o interior é imposto um valor de referência ao qual está associado um tempo de relaxação. Os fluxos através da superfície são determinados de forma análoga ao fluxo de quantidade de movimento (Large & Pond, 1982). No fundo assume-se condições de fluxo nulo para ambas as propriedades.

A pressão baroclínica é calculada com base num referencial cartesiano independentemente da coordenada utilizada. Esta metodologia permite evitar erros associados à transformação de coordenadas que se observa noutro tipo de coordenadas.

Os coeficientes de difusão vertical são obtidos recorrendo a um fecho de turbulência. No MOHID2000 são todos os fechos incluídos no GOTM (Modelo Geral de Turbulência Oceânica: <u>http://www.gotm.net</u>, Burchard et al., 1999) – entre eles está o fecho de Mellor e Yamada.

3.3 - Módulo de Turbulência

O módulo de turbulência no modelo MOHID é baseado no módulo de turbulência do modelo GOTM (General Turbulence Ocean Model, http://www.gotm.net). 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 principio de viscosidade turbulenta, que nos 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- ϵ e Mellor-Yamada) são os que descrevem mais realisticamente a física da 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 modelo 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 demostrado 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 modulo de turbulência do modelo GOTM pode consultar-se a página web (<u>http://www.gotm.net</u>).

Os modelos de turbulência de duas equações no MOHID3D (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:

$$v_{t} = c_{\mu} \sqrt{k} L$$
$$v_{t}' = c'_{\mu} \sqrt{k} L$$

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 calcula-se mediante uma equação de transporte:

$$\partial_{t}k + \partial_{z}F(k) = P + B - \varepsilon$$

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 disipativo 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:

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

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

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

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

$$\partial_t \varepsilon + \partial_z F(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon_1} P + c_{\varepsilon_3} B - c_{\varepsilon_2} \varepsilon)$$

Embora os modelos standard k- ϵ e Mellor-Yamada podem ser utilizados no MOHID, a eleição do valor de c_{ϵ 3} e as funções de estabilidade para as que se obtêm resultados mais realistas em distintas situações são diferentes das standard. Isto permite uma melhore sensível na descrição da dinámica das camadas de mistura.

4 - MÓDULO DE TRANSPORTE EULERIANO

4.1 - Considerações Gerais

O sistema MOHID inclui módulos de transporte euleriano em versões 1D, 2D, e 3D. As duas primeiras funcionam acopladas ao módulo hidrodinâmico MOHID2D. A versão tridimensional está associada ao MOHID3D, mas pode ser também usada pelo modelo bidimensional, mediante o uso de uma interface que, a partir de uma forma prédefinida do perfil vertical de velocidade e do caudal integrado na vertical, calcula a sua distribuição vertical.

Este módulo é responsável pela evolução, relativa a um referencial euleriano, de todas as propriedades físicas e biogeoquímicas da água. Neste momento é possível simular a evolução de uma extensa lista de propriedades:

1. Temperatura

- 2. Salinidade
- 3. Fitoplancton
- 4. Zooplancton
- 5. Peixes
- 6. Bacterias
- 7. Larvas
- 8. Fósforo Organico
- 9. Fósforo Inorganico
- 10. Azoto Organico Particulado
- 11. Azoto Organico Dissolvido Refractário
- 12. Azoto Organico Dissolvido Não-Refractário
- 13. Amonia
- 14. Nitrato
- 15. Nitrito
- 16. Oxigénio
- 17. Sedimentos Finos
- 18. Arsénio Particulado
- 19. Arsénio Dissolvido
- 20. CBO (Carência Bioquímica de Oxigénio)

4.2 - Equações a resolver

A equação a resolver resulta do balanço de massa a um volume de dimensões finitas que para uma substância conservativa se escreve:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{vc} cdV + \iint_{area} \left(c(\vec{v}.\vec{n}) + \upsilon \frac{\partial c}{\partial \vec{n}} \right) dA = 0$$

No caso de a substância não ser conservativa o segundo membro da equação será igual ao somatório (*Fontes-Sumidouros*).

4.2.1 - Caso tridimensional

No caso tridimensional de um volume de paredes verticais e faces alinhadas com o referencial, com dimensões suficientemente reduzidas para que a propriedade possa ser considerada constante no seu interior e em cada uma das suas faces, a equação anterior pode escrever-se na forma:

$$\frac{\partial Hc}{\partial t} + \frac{\partial Q_x c}{\partial x} + \frac{\partial Q_y c}{\partial y} + (Wc)_s - (wc)_i = \frac{\partial}{\partial x} \left(H\vartheta_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(H\vartheta_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \left(-\vartheta_z \frac{\partial c}{\partial z} \right)_i - \left(-\vartheta_z \frac{\partial c}{\partial z} \right)_s$$

Nesta equação é ainda admitido que o volume de controlo tem altura H variável no tempo, sendo a área horizontal igual ao produto $\Delta x \Delta y$. Q é o caudal volúmico através de cada uma das faces e W é a componente vertical da velocidade. Os índices "s" e "j" identificam as faces superiores e inferiores, respectivamente.

4.2.2 - Caso bidimensional integrado na vertical

No caso bidimensional integrado na vertical a equação é a mesma, sendo neste caso H a altura local do escoamento e Q_z nulo. Os fluxos difusivos segundo z representam as trocas com a atmosfera e com o fundo, caso existam.

4.3 - Caso unidimensional

Neste caso a equação é obtida a partir da equação geral exactamente do mesmo modo, mas porque o comprimento do volume segundo yy é variável, o volume é expresso como o produto da área vertical (variável no tempo) pelo comprimento do volume de controlo, constante no tempo. Deste modo obtém-se:

$$\frac{\partial A_v c}{\partial t} + \frac{\partial Q_x c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\vartheta A_v \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \left(-L_f \vartheta \frac{\partial c}{\partial z} \right)_f - \left(-L_s \vartheta \frac{\partial c}{\partial z} \right)_s$$

Nesta equação A_v é a área da secção vertical, L_f é o perímetro molhado e L_s é a largura à superfície.

4.4 - Discretização espacial

A discretização espacial utiliza um formulação do tipo volume finito, de forma a assegurar a conservação da massa. Para a difusão o modelo usa diferenças centradas. Para a advecção, na vertical (caso tridimensional) o modelo usa uma formulação descentrada no espaço (*upwind*), podendo na horizontal o utilizador optar por várias discretizações (diferenças centradas, *upwind*, QUICK). A consideração de outras formas de discretização é muitos simples neste modelo, dada a estrutura do programa. A opção por métodos com menor difusão numérica (e.g. QUICK) é determinada em função importância da advecção face à difusão.

4.5 - Discretização temporal

A discretização temporal tem consequências ao nível da precisão do método e da estabilidade. Os métodos completamente explícitos ou implícitos originam mais difusão numérica do que os centrados no tempo. Os explícitos têm maiores limitações de estabilidade mas exigem menos esforço de cálculo. Assim a opção põe-se entre métodos explícitos e métodos centrados no tempo.

O modelo permite o uso de ambos na versão uni/bidimensional. A versão tridimensional permite esta opção para o transporte vertical mas não para o horizontal

que é sempre explícito. Com efeito, no caso tridimensional a estabilidade dos modelos explícitos está limitada pelo transporte vertical e pela propagação de ondas de superfície no modelo hidrodinâmico. Assim o passo temporal a utilizar é sempre suficientemente pequeno para não introduzir limitações de estabilidade ou de precisão devido ao transporte explícito na horizontal.

4.6 - Implementação

Este módulo pode ser utilizado acoplado directamente ao modelo hidrodinâmico ou pode fazer a leitura de um ficheiro com resultados da hidrodinâmica e ser utilizado de forma autónoma. Há alguns anos atrás esta era a melhor opção. Com o poder de cálculo actual a primeira é a opção por defeito.

Os dados deste módulo, tal como nos outros, são fornecidos através de ficheiros onde a informação está organizada com "palavras-chave". No caso de a(s) substâncias a transportar serem não conservativas este módulo chama um outro para as fontes e os sumidouros. A interface entre os dois está organizada de tal modo que o modelo de qualidade é independente do número de dimensões e de a formulação em uso ser euleriana ou lagrangeana. O módulo de qualidade da água pode ser muito simples (e.g. decaimento de primeira ordem) ou resolver um sistema de equações para cada ponto, com a interdependência das variáveis.

No caso de a variável a transportar serem sedimentos, a interacção com o fundo fazse através dos fluxos advectivo e/ou difusivo nas faces inferiores dos volumes finitos adjacentes ao fundo. Ainda no caso dos sedimentos, à velocidade vertical do escoamento deve ser adicionada a velocidade de queda dos sedimentos, que para os coesivos é função da concentração e da sua composição.

4.7 - Transporte de Sedimentos Finos

4.7.1 - Velocidade de Queda

As trocas de partículas de sedimentos entre as camadas do modelo podem ser devidas à advecção vertical, queda das partículas ou difusão turbulenta. A velocidade vertical do fluxo e a difusividade turbulenta são calculadas pelo modelo hidrodinâmico. A velocidade de queda depende das forças gravitacionais e da tensão de corte vertical devida ao movimento de queda. As forças gravitacionais dependem da densidade de cada partícula individual, da formação de flocos e da forma como se processa a floculação.

A força de atrito depende da forma do floco e do número de Reynolds do escoamento durante a queda. Para partículas muito pequenas o escoamento é laminar e o quociente entre as forças gravitacionais e as forças de atrito varia na razão inversa do diâmetro das partículas. Assim, a velocidade de queda aumenta com o diâmetro das partículas. No entanto, não existe uma relação directa entre a dimensão dos flocos e a velocidade de queda, uma vez que flocos maiores podem apresentar uma menor densidade.

Numa dada suspensão deve esperar-se que quando a dimensão dos flocos aumenta a velocidade de queda média da matéria em suspensão também aumente, mesmo que os flocos com maiores velocidades de queda não sejam os de maiores dimensões. Para aumentar a dimensão dos flocos as partículas têm de agregar-se, dependendo a probabilidade de agregação da probabilidade das partículas colidirem o que acontece na razão directa do aumento da concentração.

Consequentemente, a velocidade de queda deve aumentar com a concentração da suspensão, até que o movimento descendente das partículas interfira com o correspondente movimento ascendente da água. Nestas condições um incremento da concentração implica um decréscimo da velocidade de queda (C_{HS}). Dyer (1986) propõe a seguinte correlação para a velocidade de queda:

$$W_{S} = K_{1}C^{m}$$
 : $C < C_{HS}$
 $W_{S} = W_{0}(1.0 - C)^{m_{1}}$: $C > C_{HS}$

sendo: W_s a velocidade de queda das partículas (m s⁻¹); W_0 a velocidade de queda de uma simples partícula (m s⁻¹); K_1 uma constante de proporcionalidade que depende da mineralogia dos sedimentos (kg m⁻⁴s); $m \in m_1$ coeficientes que dependem do tamanho e forma das partículas.

O processo de floculação depende da colisão mas também da coesão das partículas. A relação anterior considera o efeito da floculação como uma queda diferencial.

Na presença de concentrações crescentes a probabilidade de colisões entre partículas aumenta, permitindo a produção de maiores flocos com maiores velocidades de queda. A probabilidade de maior coesão aumenta com a salinidade. Salinidades entre 1‰ e 2.5‰ são suficientemente grandes para permitirem uma intensificação da floculação induzindo maiores velocidades de queda (Wollast, 1986).

4.7.2 - Interacção com o Fundo

Não existe ainda um acordo total entre a comunidade científica acerca da maneira como se processam as trocas de sedimentos entre a coluna de água e o fundo. Para alguns experimentalistas a erosão e a deposição são processos simultâneos (Stanford & Halka, 1993). Quando a resuspensão é mais forte que a deposição existe erosão. A forma tradicional de lidar com este problema segue as ideias de Einstein (1950) e considera que erosão e sedimentação não podem ocorrer simultâneamente. Neste caso são definidas tensões de corte críticas para erosão e deposição e é assumido que entre estas tensões de corte não existe fluxo através da interface do fundo.

Ambas as formulações podem ser facilmente incluídas em modelo, assumindo-se no MOHID3D a abordagem tradicional devido à maior facilidade de encontrar na literatura os dados para especificar os parâmetros necessários.

4.7.3 - Modelo de Erosão

O algoritmo que representa a erosão é baseado na aproximação clássica de Partheniades (1965). Segundo este autor a erosão ocorre quando a tensão de corte ambiente excede o valor crítico para o início de movimento do material do fundo.

O fluxo de material erodido é avaliado pela taxa de troca de sedimentos no fundo (assumindo-se que existem condições de erosão não ocorre sedimentação):

sendo: (d M_E/dt) os fluxos de erosão; tensão de corte no fundo ; $_{E}$ tensão de corte crítica para a erosão; *E* uma constante de erosão (kg m⁻² s⁻¹).

A constante de erosão E depende das características fisico-químicas das partículas de sedimento sendo variável no espaço.

A tensão crítica de erosão é função da coesão dos sedimentos de fundo e do respectivo grau de compactação. Este último factor pode ser avaliado com base no valor da densidade seca dos sedimentos de fundo.

Stephens et al (1992), baseados nas formulações propostas por Delo (1988), propôem uma expressão para a descrição da tensão crítica de erosão:

$$\tau_E = A_1 (\rho_d)^{E_1}$$

sendo: E a tensão crítica de erosão (kg m⁻¹s⁻²); _d a densidade seca dos sedimentos do fundo (kg m⁻³); A_1 e E_1 coeficientes dependentes do tipo de sedimento.

Para que esta equação seja dimensionalmente correcta A_I deve referir-se á superfície e E_I deve ser igual a 1. No entanto Stephens et al (1992) calibraram o respectivo modelo com $A_I = 0.0012$ m² e $E_I = 1.2$. Na realidade esta relação representa uma grande simplificação da realidade, uma vez que a erodibilidade de um fundo coesivo também é função da sua natureza coesiva dependendo, de uma forma ainda pouco conhecida, dos minerais de argila e de processos geoquímicos e microbiológicos que ocorrem no fundo.

4.7.4 - Modelo de Deposição

O algoritmo de deposição, tal como o que controla a erosão, é baseado na hipótese de que os fenómenos de erosão e deposição não podem ocorrer simultâneamente. O algoritmo utilizado foi originalmente de senvolvido por Krone (1962) e posteriormente modificado por Odd & Owen (1972). Segundo este modelo, a probabilidade de um floco atingir o fundo é unitária se a tensão de corte do fundo for zero, sendo nula se a

tensão de corte for maior que a tensão crítica de deposição, apresentando nos restantes casos uma variação linear entre estes valores extremos.

5 - TRANSPORTE DE AREIAS

5.1 - Introdução

O módulo de transporte de areias, SEDTRAN, é constituído por um conjunto de rotinas que permitem determinar a evolução dos fundos em estuários e zonas costeiras sujeitas à acção singular de ondas e correntes ou à acção combinada de ondas e correntes.

Para uma dada batimetria, tipo de sedimentos e correntes locais, este modelo calcula a capacidade de transporte sobre uma malha rectangular que cubra a zona de interesse. As taxas de erosão/sedimentação em cada ponto da malha são então estimadas, permitindo obter ainda os valores integrais dos volumes de erosão e sedimentação.

As correntes podem ter diversas origens, tanto podendo ser devidas à maré como ser induzidas pelas ondas ou pelo vento. Os sedimentos são assumidos como sendo não coesivos, isto é, areias, podendo ser considerados diversos diâmetros sobre a área do modelo.

O modelo foi concebido por forma a poder funcionar ou como uma rotina do módulo hidrodinâmico (2D ou 3D) ou, em alternativa, utilizar como informação os valores de velocidades em cada ponto da malha de cálculo. Estas velocidades podem corresponder a correntes de maré, correntes devidas ao vento ou correntes produzidas pelas ondas.

No caso da circulação litoral a informação necessária sobre os campos de ondas pode ter origem quer em modelos de refracção "REFRAC", quer em modelos de refracçãodifracção "REFDIF" quer em modelos mais complexos como seja o modelo que resolve as equações de Boussinesq "MOHID2D". A opção por um ou outro modelo para o cálculo dos campos de ondas deve ser feita de acordo com as necessidades específicas de cada caso uma vez que envolve meios de cálculo diferentes.

A ligação entre os diversos modelos atrás referidos é efectuada automaticamente uma vez definidas as características do cálculo que se pretende efectuar. Os ficheiros de *output* de cada modelo funcionam como ficheiros de *input* do modelo seguinte, bastando assim ao utilizador fornecer os dados específicos de cada módulo.

As principais aplicações do modelo SEDTRAN estão relacionadas com problemas de erosão/sedimentação em torno de estruturas costeiras, tais como quebra-mares e esporões, em estuários (particularmente na zona das barras onde a interacção ondascorrentes pode desempenhar um papel importante), ou ainda em obras costeiras em geral.

5.2 - Características Gerais

O modelo de transporte de sedimentos não coesivos SEDTRAN, oferece ao utilizador uma ampla escolha em termos das fórmulas de transporte a utilizar, permitindo assim efectuar análises de sensibilidade sobre qual das fórmulas descreve melhor a zona de interesse. No caso das correntes de maré estão disponíveis as expressões de Einstein (bed load e suspended load), Meyer-Peter y Muller, Frijlink e Ackers-White, enquanto que no caso das ondas estão disponíveis as fórmulas de Bijker, Baillard e Van-Rijn (transporte por acção de ondas e correntes).

As variações na profundidade observadas em cada ponto da malha são descritas com base na equação da continuidade, a qual é resolvida com base num algoritmo de diferenças finitas.

 $\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial T_x}{\partial x} + \frac{\partial T_y}{\partial y} = 0$ sendo, *x*, *y* - Coordenadas horizontais *z* - Cota do fundo *T_x* - Transporte na direcção x *Ty* - Transporte na direcção y

No caso do esquema mais complexo da determinação do transporte de areias por acção combinada de ondas e correntes, os diversos módulos interagem entre si de acordo com o esquema da Figura seguinte. O cálculo das características das ondas deve ser efectuado a intervalos que permitam considerar variações pequenas das correntes e do nível da maré (e.g. 2 horas).



Figura 2 - Esquema de funcionamento do módulo de transporte de areias

6 - MÓDULO DE TRANSPORTE LAGRANGEANO

6.1 - Considerações Gerais

O módulo de transporte lagrangeano do sistema do modelos MOHID tem diversas aplicações, possibilitando a simulação do movimento de traçadores com determinadas

propriedades, com base num campo de velocidades calculado com os módulos hidrodinâmicos 2D ou 3D.

Os traçadores podem ser utilizados para simular os mais diversos tipos de fenómenos como sejam, por exemplo, a dispersão de efluentes, o deslocamento de manchas de resultantes de acidentes, a qualidade da água, fenómenos ecológicos com simulação em grandes caixas, etc.

Sinteticamente, o esquema de cálculo, pode dividir-se em três grandes passos: Geração, transporte, eliminação dos traçadores. Estes processos são comuns quer se trate de modelos 1D, 2D ou 3D.

6.2 - Metodologia

Os traçadores apresentam seis características principais: coordenadas espaciais (x,y,z), velocidade aleatória horizontal/vertical, tempo durante o qual o traçador mantém a velocidade aleatória, velocidade de sedimentação, massa e volume. Para cada umas destas propriedades uma equação de evolução tem que ser resolvida. A massa pode ser um *array* de propriedades (ex: nutrientes, fitoplancton, matéria em suspensão, etc.). As últimas cinco propriedades são opcionais. Se não forem consideradas só movimento médio das partículas é estudado.

6.3 - Termo advectivo

Geralmente a velocidade média é a principal responsável pelo movimento dos traçadores. As coordenadas espaciais são calculadas a partir da definição de velocidade:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}_{\mathrm{i}}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{u}_{\mathrm{i}}(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}, t)$$

sendo esta equação resolvida aplicando um método explícito simples do tipo:

$$\mathbf{x}_{i}^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_{i}^{t} + \Delta t. \mathbf{u}_{i}'$$

A aplicação de métodos de ordem mais elevada implica a utilização de procedimentos iterativos. Um método deste tipo (método de *Heun*) foi utilizado por Monteiro, 1995, correspondendo a um esquema de previsão-correcção de dois níveis temporais com um grau de precisão de 2ª ordem no tempo.

No entanto, a adopção de um método de ordem mais elevada torna-se necessário somente quando as linhas de corrente apresentam uma curvatura acentuada e o passo temporal é elevado. Para maioria dos escoamentos naturais a precisão associada ao método explicito é suficiente para se obter bons resultados.

6.4 - Termo difusivo

O transporte turbulento é responsável pela dispersão. O efeito dos vórtices sobre os traçadores depende da razão entre o tamanho dos vórtices e dos traçadores. Vórtices maiores que os traçadores induzem um movimento aleatório ao traçador. Vórtices mais pequenos que os traçadores originam entrada de matéria para dentro do traçador aumentando o seu volume e a sua massa de acordo com a concentração do meio envolvente.

6.4.1 - Deslocamento aleatório

O movimento aleatório é calculado recorrendo ao procedimento adoptado por Sullivan, 1971 e por Allen, 1982. O movimento aleatório é calculado utilizando o comprimento de mistura e a variância da velocidade turbulenta, valores dados pelo modelo de turbulência adoptado para o fecho do modelo hidrodinâmico. Os traçadores mantêm a velocidade aleatória ou turbulenta durante o tempo necessário para percorrer o comprimento de mistura.

6.4.2 - Aumento do volume

O aumento de volume dos traçadores está associado à turbulência de pequena escala, sendo razoável admitir que este é isotrópico. Nestas condições os traçadores mantêm a sua forma inicial e o aumento de volume é função do próprio volume.

Ozmidov postulou a hipótese de fornecimento de energia quase discreto ao oceano. De acordo com esta teoria a injecção de energia no oceano, por fontes externas está concentrada na vizinhança de três escalas características do escoamento: escala da circulação geral, escala das oscilações inérciais e da maré (~10 Km) e escala das ondas induzidas pelo vento (~10m). Um dos principais resultados deste postulado é entre os pontos de injecção de energia o coeficiente de difusão turbulento horizontal pode ser descrito pela "lei dos 4/3 de Kolmogorov".

Para condições de isotropia a solução da equação de difusão tridimensional, correspondente a uma emissão pontual na origem xi=0 e assumindo que o coeficiente de difusão depende do tamanho da pluma.

O utilizador pode especificar um volume máximo a partir do qual o traçador é eliminado, isto é, um valor a partir do qual se considera que a concentração dentro do traçador é aproximadamente igual à concentração normal do meio.

6.5 - Fontes e Poços

O modelo tem por principal objectivo resolver os termos advectivo e difusivo da equação de transporte, enquanto os termos fontes-poços são resolvidos por módulos separados que se acoplam ao modelo. Entre estes módulos destacam-se o módulo ecológico, que simula a dinâmica do zooplancton (consumo primário), do fitoplâncton (produção primária) e dos nutrientes em cada traçador (Rodrigues et al., 1996) e o

módulo de hidrocarbonetos que simula as alterações das propriedades físico-químicas e o espraiamento por dispersão mecânica de manchas de hidrocarbonetos.

No entanto, existem alguns processos de fonte e poço que se podem simular de forma simplificada, como primeira aproximação ao problema, sem ser necessário recorrer a algoritmos complexos que justifiquem o desenvolvimento de módulos separados, que é o caso da inactivação bacteriológica e a sedimentação e ressuspensão de sedimentos. Apesar da estrutura simplista dos algoritmos desenvolvidos para simular os processos referidos, estes são uma ferramenta muito útil e versátil numa primeira abordagem a problemas de qualidade da água e de dispersão de sedimentos contaminados.

6.5.1 - Inactivação bacteriológica

A inactivação bacteriológica é condicionada por uma grande variedade de factores (Monteiro, 1995):

- 1 radiação solar;
- 2 -temperatura;
- 3 salinidade;
- 4 predação pelo biota do meio receptor;
- 5 concentração de nutrientes;
- 6 substâncias tóxicas;
- 7 sedimentação após descarga;
- 8 ressuspensão de sedimentos contaminados;
- 9 taxa de crescimento dos microorganismos no meio receptor.

De todos estes factores o que condiciona mais a inactivação bacteriológica é sem dúvida a radiação solar. Num ambiente sem luz o processo de inactivação pode demorar pelo menos duas ordens de grandeza mais, do que mesmo processo exposto à radiação solar. Na simulação da inactivação admite-se normalmente que esta segue uma reacção de primeira ordem do tipo:

$$\frac{dC}{dt} = -K_BC \qquad \land \qquad K_B = \frac{\ln 10}{T_{90}}$$

sendo K_B a taxa de inactivação; T_{90} o tempo necessário para a concentração de bactérias ser reduzida em 90%; C a concentração de bactérias.

A equação anterior é resolvida por um método implícito, que assegura que a concentração no instante t+∆t seja sempre positiva:

$$\frac{C(t + \Delta t) - C(t)}{\Delta t} = -K_B C(t + \Delta t) \Leftrightarrow \frac{M(t + \Delta t) - M(t)}{\Delta t \times V(t + \Delta t)} = -K_B \frac{M(t + \Delta t)}{V(t + \Delta t)} \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow M(t + \Delta t) = \frac{M(t)}{(1 + K_B \times \Delta t)}$$

sendo M o número total de bactérias associadas ao traçador; V o volume do traçador.

6.5.2 - Sedimentação/ressuspensão

O algoritmo simplificado de sedimentação/ressuspensão desenvolvido visa principalmente, numa primeira aproximação, simular a dispersão duma emissão localizada de sedimentos contaminados. Esta emissão pode ser devida à ressuspensão de sedimentos durante trabalhos de dragagem, ao depósito de material dragado em áreas costeiras, a um rio caracterizado por elevado grau de poluição, etc.

Para simular o processo de sedimentação associou-se a cada traçador uma velocidade de queda que pode ser dada directamente ou calculada a partir dum diâmetro característico, d, recorrendo às equações que calculam a velocidade de queda, w_s , de partículas não-esféricas (Rijn, 1989).

$$w_{s} = \frac{(s-1)gd^{2}}{18v} \qquad 1 < d < 100 \ \mu m$$
$$w_{s} = \frac{10v}{d} \left[\left(1 + \frac{0.01(s-1)gd^{3}}{v^{2}} \right)^{0.5} - 1 \right] \qquad 100 < d < 1000 \ \mu m$$
$$w_{s} = 1.1 [(s-1)gd]^{0.5} \qquad d > 1000 \ \mu m$$

sendo d o- diâmetro característico; s a gravidade específica; v a viscosidade cinemática.

O traçador ao chegar ao fundo só sedimenta se a tensão de corte do escoamento for inferior a uma tensão crítica de sedimentação, $\tau_{sedimentação}$, especificada pelo utilizador. Esta tensão crítica é a tensão máxima que o escoamento pode ter de modo a se dar o processo de sedimentação. Por outro lado, se a tensão do escoamento for superior a uma tensão crítica de erosão (ou ressuspensão), $\tau_{ressuspensão} > \tau_{sedimentação}$, os traçadores até então sedimentados voltam a ser recolocados na coluna de água. Uma vez que o processo de ressuspensão é extremamente complexo, podendo no caso dos estuários os sedimentos serem ressuspendidos alguns centímetros ou alguns metros, optou-se por recolocar os traçadores aleatoriamente na coluna de água, no caso de haver condições de ressuspensão. O algoritmo simplificado que simula o processo de ressuspensão só pode aplicado a águas pouco profundas e bem misturadas.

6.6 - Emissão

O módulo de transporte lagrangeano permite a selecção de 5 tipos diferentes de emissão dos traçadores:

- 1 emissão pontual;
- 2 emissão em caixas;
- 3 emissão em caixas com monitorização;
- 4 acidente;
- 5 emissão pontual com monitorização.

A emissão pontual consiste em emitir traçadores num determinado ponto do domínio, tendo por principais objectivos simular trajectórias de bóias derivantes e a dispersão de efluentes. Na simulação de uma bóia derivante apenas é emitido um traçador por origem, sendo o seu deslocamento gravado em todas as iterações. No caso da simulação da dispersão de efluentes é associado um caudal mássico a cada origem que é simulado na forma de emissão continua de traçadores. Esta emissão não é rigorosamente contínua mas sim espaçada de um intervalo de tempo definido pelo utilizador, podendo ser emitidos um mais traçadores de cada vez, sendo este número também definido pelo o utilizador.

A emissão em caixas basicamente é utilizada para caracterizar massas de água e compreender os mecanismos de trocas ao longo de secções. Este tipo de emissão consiste em definir uma origem não como um ponto, mas sim uma área do domínio, sendo emitido em cada célula hidrodinâmica pertencente a cada caixa (ou origem) traçadores de iguais características. Existem duas opções de emissão: emitir um traçador por cada célula hidrodinâmica da caixa, ou associar a cada caixa um volume para os traçadores, sendo o número de traçadores a emitir por célula igual ao volume desta a dividir pelo o do traçador. Esta última opção é utilizada para caracterizar trajectórias de grandes massas de água.

A emissão tipo acidente foi desenvolvida para simular emissões quase instantâneas de grandes massas de poluentes, estando especialmente vocacionada para a simulação de material flutuante, que é o caso dos hidrocarbonetos. Como já foi anteriormente referido este modelo não simula processos complexos associados aos termos fonte e poço, mas pode servir de base para o desenvolvimento de um módulo que simule esses processos. Este tipo de emissão consiste em emitir um elevado número de traçadores, a definir pelo utilizador, numa área que será função da massa volúmica do poluente a emitir e da espessura inicial da mancha. Ao longo do tempo é calculada para cada célula do modelo hidrodinâmico a espessura da mancha, que não é mais do que a massa total dos traçadores que existem na célula vezes a massa volúmica do poluente a dividir pela área da célula.

As emissões em caixas e pontual com monitorização consistem em calcular o tempo de residência dos traçadores em áreas definidas pelo utilizador. A emissão em caixas com monitorização é utilizada para calcular tempos de residência de grandes massas de água e para calcular trocas entre secções. A emissão pontual com monitorização é utilizada para calcular tempos de residência de água com origem em efluentes.

6.7 - Transporte de Manchas

O óleo crude ou simplesmente óleo não é uma substância uniforme. Pois é resultado da mistura de muitos hidrocarbonetos (HC's), com diferentes propriedades e de pequenas quantidades de substâncias orgânicas.

É importante referir que, quer para as operações de contenção e recolha, quer para o conhecimento do comportamento do óleo derramado no mar, é necessário ter uma base de dados das propriedades fisicas, químicas e biológicas dos vários compostos do óleo.

As características do óleo são obtidas a partir de uma base de dados de nome ADIOS (*Automated Data Inquiry for Oil Spills*) que tem as características completas de cerca de 1000 tipos de óleo cru e de refinados. Esta base de dados foi desenvolvida pela *Hazardous Materials Response and Assessment Division* da NOAA.

No âmbito dos modelos de poluição por HC's, 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.

Nas considerações que se seguem admite-se que o transporte da mancha de óleo crude é independente da evolução da mancha e das características fisico-químicas do petróleo.

O transporte do centro de massa de uma mancha é pois influenciado pelos seguintes processos:

- correntes
- vento
- força de Coriolis
- movimento da fonte

O efeito da vaga e ondulação é normalmente desprezado em mar aberto, devido à sua natureza auto-cancelativa e quando comparado com os restantes. O movimento da fonte é importante unicamente no caso da emissão contínua. Como a força de Coriolis é normalmente incluída na descrição das correntes resta assim a descrição do campo de correntes e vento, conforme será visto mais adiante.

Quando o óleo é derramado no mar, tende a espalhar-se e formar uma mancha. A acção de espalhamento bi-dimensional à superfície é provocada pelas forças gravítica e de atrito e pela tensão superficial. Fay (1969) criou um modelo capaz de descrever o fenómeno do espalhamento do óleo derramado. No entanto as observações de campo têm mostrado que o mecanismo de espalhamento é mais complicado, pois o óleo quando derramado na água, tende a separar-se em dois domínios distintos: um domínio interior de óleo viscoso emulsionado com espessuras a variar entre 1 e 20 mm e um domínio exterior com uma camada de óleo muito fina a variar entre os 0.01 e os 0.001 mm.

De acordo com Stewart (I976), a área coberta pela camada fina pode ser 4 vezes maior que a menos espessa mas o volume do óleo existente na camada espessa é cerca de 90% do volume total do óleo derramado.

Assim, a mancha de óleo tende a dividir-se em pequenas manchas, estando este fenómeno físico mais relacionado com a turbulência do ar e da água do mar do que propriamente com a tensão superficial. A taxa de espalhamento, por seu lado depende das propriedades do óleo e do seu grau de envelhecimento, conforme será abordado no parágrafo seguinte.

Adoptando, uma discretização temporal por patamares, nos quais cada evento e decisões serão contemplados de um modo perfeitamente definido com a notação (n), serão introduzidos no modelo as seguintes variáveis para descrever a mancha de óleo:

- ⇒ Em cada novo patamar um novo volume de óleo é descarregado e uma nova mancha é criada. Consequentemente, o número de manchas no patamar (n) não pode ser superior a (n).
- ⇒ O modelo irá fazer o seguimento de cada mancha, desde o início até ao final do evento. Para tal a mancha (s) é considerada como tendo forma circular, com raio R_s(n) e com espessura th_s(n).

A configuração típica do derrame idealizado está representada na Figura 3. Nesta figura a mancha s, criada no patamar s, tem raio $R_s(3)$ e uma espessura th_s(3), com s=1, 2, 3.



Figura 3 - Configuração de um derrame de crude no patamar (3).

À medida que o óleo se espalha é também movido pela acção indutora do vento e da corrente. Existem na literatura muitos tipos de fórmulas de transporte mais ou menos sofisticadas, mas tem sido aplicada com sucesso a fórmula que se apresenta a seguir, a qual permite determinar o vector velocidade de deriva do derrame <u>U</u>_{Oil,n}, através da adição vectorial das velocidades da corrente e do ar (Scory, 1990).

 $\underline{U}_{oil,n} = \underline{U}_{water,n} + \underline{U}_{air,n}$

sendo: $\underline{U}_{oil,n}$ o vector velocidade do centro de massa do derrame, $\underline{U}_{water,n}$ o vector da corrente média, $\underline{U}_{air,n}$ o vector da velocidade do vento l0 m acima do nível do mar e um coeficiente de deriva do vento (=3,15%)

Caso seja possível abordar a advecção da mancha de óleo em regime com base numa descrição tridimensional, é possível determinar, através do modelo de circulação de ventos e correntes, o vector U_{oil,n} numa camada de profundidade escolhida (a variar entre 1 e 10 m, dependendo da batimetria):

 $\underline{U}_{oil,n} = \underline{U}_{r,n}$

onde <u>U_{r,n} representa o vector corrente aparente média de profundidade</u>

A determinação das coordenadas do centro de massa do derrame, é efectuada assumindo que num curto intervalo de tempo t a velocidade permanece constante. Deste modo, relativamente à origem do nosso sistema de coordenadas cartesiano, pode dizer-se que:

 $I_n = I_{n-1} + \underline{U}_{oil,n} \cdot t$

Este procedimento está, de seguida ilustrado na Figura 4.



Figura. 4 - Sistema de coordenadas e grelha adoptadas.

Assim, dadas as coordenadas iniciais do derrame, o modelo de transporte cria uma sequência de valores para l_n (n = I, 2, 3, ..., N), ou seja, uma sequência de valores das coordenadas do centro de massa do derrame (x_n, y_n). Em cada patamar n, cada centro geométrico de uma mancha é deslocado pela resultante da soma vectorial desde o ponto (x_{s,n}; y_{s,n}) para o ponto (x_{s,n+1}; y_{s,n+1}), onde s representa a s^a mancha. Se considerarmos que V_{s,n} representa o volume da mancha s no patamar n, as coordenadas do centro de massa do derrame serão dadas por:

$$xn = x_{s,n} \cdot V_{s,n} / V_{s,n}$$
. e $yn = y_{s,n} \cdot V_{s,n} / V_{s,n}$

6.7.1 - Espalhamento

Assumindo que a mancha é circular e que tem uma espessura uniforme em termos espaciais, mas variável em termos temporais, o óleo é espalhado sob a influência de cinco forças. As forças de espalhamento são a gravidade específica e a tensão superficial, as forças retardadoras são a inércia, a viscosidade interna e a viscosidade interfacial (óleo-água).

A evolução do raio da mancha será na maior parte dos casos semelhante aquela que se mostra na Figura 5., onde se podem identificar três fases:

- a fase inicial onde dominam as forças gravítica e de inércia
- a fase intermédia, onde as forças de gravidade e viscosas são as mais importantes
- a fase final onde a tensão superficial supera as forças viscosas



Figura 5 - raio da mancha em função do tempo.

O modelo de espalhamento é baseado na aproximação da espessura uniforme. Mas será maís realista se se considerar a espessura menos provável (e-p) e a espessura mais provável (e+p).

De acordo com Stewart (I976), 90% do volume de óleo cobrirá 20% da área da mancha, pelo que:

 $e+p = 0.9 V / (0.2 S) = 0.9 R^2 h / (0.2 R^2) = 4.5 h$

e-p = 0.1 V / (0.8 S) = 0.125 h

Quando o modelo tem que simular o envelhecimento de uma mancha de óleo extensa ou um processo de transformação contínuo, o derrame será representado por um

conjunto de várias manchas circulares de óleo, conforme já foi referido no parágrafo anterior. Este artefacto tem dado bons resultados quer para o processo de espalhamento quer para o processo de envelhecimento.

Em zonas costeiras, onde é necessário simular a mancha com uma nuvem de traçadores elementares, utiliza-se o método de calcular o espalhamento em função do gradiente de espessura local. Assim, cada traçador, que representa um volume elementar, move-se por ação da corrente marítima, do vento e da velocidade induzida por aquele gradiente. Este método é calibrado com as relações conhecidas de espalhamento de manchas em mar aberto.

6.7.2 - Envelhecimento

Operar com um modelo previsional do comportamento do óleo em tempo real implica que seja necessário tirar o melhor partido das informações disponíveis de quando acontece um acidente. Isto significa que só são úteis as relações que dêem uma boa ideia da grandeza de um dado processo sem que sejam necessárias análises sofisticadas. Uma outra consequência do ponto de vista do tempo real prende-se com o facto de só interessarem os processos de curta duração após o derrame, normalmente com durações máximas de uma ou duas semanas.

No processo de envelhecimento do presente modelo, são contemplados os seguintes fenómenos:

- evaporação,
- trocas directas mar-ar,
- emulsões,
- dispersão vertical
- dissolução,
- acções de combate: recuperação mecânica e dispersão vertical conseguido,
- alterações de densidade,
- alterações da tensão superficial,
- alterações da viscosidade do óleo.

Ficará excluído o processo de bio-degradação por ter uma escala temporal maior.

As influências ambientais restringem-se à velocidade do vento ($\underline{U}_{air,n}$) e à altura da ondulação significativa (H_s), sendo esta última considerada em termos de quantificador de turbulência.

6.7.3 - Evaporação

O processo ocorre dentro de poucas horas a seguir ao derrame, as fracções mais voláteis de um óleo derramado são libertas para a atmosfera num grau determinado pela velocidade do vento, temperatura ambiente e tipo de óleo.

A evaporação pode remover entre 20 a 50% do óleo crude derramado, mais de 75% do petróleo refinado e 10% ou menos dos fuel-óleos, tais como o "bunker C".

Os resíduos que permanecem no mar ficam com uma densidade e viscosidade maiores que as do óleo original pois a maior parte dos óleos crude perdem mais de 40% do seu volume nas 48 horas iniciais, facilitando deste modo o processo de afundamento. Os produtos leves refinados como a gasolina, querosene e gasóleo evaporam-se quase completamente em poucas horas, criando um risco de incêndio em áreas confiadas tais como portos e ancoradouros. A toxicidade das classes atrás mencionadas aumenta ao longo das séries:

ALCANOS < NAFTENOS < ASFALTENOS < AROMÁTICOS

6.7.4 - Trocas directas mar-ar

Assume-se que as trocas directas mar-ar são directamente proporcionais ao estado do mar e ao volume de óleo inalterado, uma vez que o mau tempo favorece a dispersão aérea sob a forma de aerossóis (distribuição uniforme de gotículas na atmosfera com diâmetros inferiores a I m). Estas partículas podem percorrer vários quilómetros e reagir quimicamente com a atmosfera, resultando na redeposição dos compostos menos voláteis sobre o mar.

6.7.5 - Dispersão

A taxa de dispersão é uma fracção da taxa de dispersão natural, expressa de forma semelhante às trocas directas mar-ar, e em que existe uma taxa adicional correspondente à possibilidade de uso de dispersantes.

6.7.6 - Dissolução

As perdas por dissolução são relativamente baixas visto que a maior parte dos hidrocarbonetos têm baixa solubilidade nas águas do mar.

Os componentes mais solúveis do óleo também tendem para ser os mais voláteis com o resultado de que as perdas por evaporação afastam a dissolução. Mesmo assirn, a evaporação é um processo longo que continua durante o processo de degradação climático.

Para este processo, assume-se que a sua taxa é directamente proporcional ao volume de óleo inalterado à superfície.

6.7.7 - Emulsão

A taxa de formação de emulsões é proporcional ao volume de óleo inalterado à superfície e à agitação do mar, visto que a emulsão é a mistura de dois líquidos não miscíveis: um (fase interna) está disperso dentro do outro (fase externa) sob a forma de gotículas, ambos estabilizados por agente emulsionante.

A tendência do óleo para formar emulsões é caracterizada, neste caso através da constante K_{em} , a qual varia entre os valores 0 e 120.

6.7.8 - Balanço total do derrame

O balanço da transferência dos diferentes volumes de óleo permite determinar a taxa de transformação do óleo.

6.7.9 - Alterações de densidade

Neste caso encontrou-se uma equação capaz de descrever a evolução da densidade ⁰ do óleo, considerando que num intervalo de tempo suficientemente pequeno, os três fenómenos que provocam o aumento de densidade do óleo actuam independentemente. Esses três fenômenos são a evaporação, emulsão e introdução de partículas na pluma.

6.7.10 - Alterações da tensão de superfície

A evolução da tensão de superfície é modelada em grande escala. Esta depende directamente da quantidade do óleo emulsionado sendo determinada por uma expressão assintótica.

6.7.11 - Alteracões da viscosidade

As alterações da viscosidade são determinadas com base numa equação proposta pela Dutch Rijkswaterstaat. No entanto esta expressão apenas contempla as situações em que o óleo sofre apenas um processo de emulsão, tendo sido introduzidas as necessárias alterações por forma a contemplar os outros processos de envelhecimento.

7 - MÓDULO DE QUALIDADE DA ÁGUA

O modelo ecológico e de qualidade da água incorporado no sistema MOHID é um modelo ecológico adimensional adaptado do modelo WASP (EPA, 1985), o que permite obter, de um modo flexível e eficiente, o seu acoplamento a um modelo hidrodinâmico, seja na formulação Euleriana ou Lagrangeana. O modelo de qualidade da água pode simular os ciclos do Azoto e do Fósforo, as concentrações de Oxigénio Dissolvido e CBO e as populações de Fito e Zooplâncton. Para o presente estudo, foram modeladas as concentrações pelágicas de Fitoplâncton, Zooplâncton e das espécies do ciclo do Azoto; estas incluem as suas três principais formas inorgânicas - amónia, nitrato e nitrito -, assim como três formas orgânicas de azoto orgânico particulado.

Apresenta-se em seguida um esquema conceptual do modelo utilizado. Os produtores primários – fitoplâncton-, consomem amónia e nitrato, dependendo da disponibilidade destes nutrientes e da radiação solar como fonte(s) de energia para a fotossíntese.



Figura 6 – Esquema conceptual do modelo de qualidade da água.

O nível trófico seguinte, constituido pelos consumidores primários ou produtores secundários – zooplâncton, consome os compostos orgânicos sintetizados pelos produtores primários, sendo o zooplâncton por sua vez consumido pelos níveis tróficos superiores. As excreções do fito e zooplâncton incluem amónia, azoto orgânico particulado e azoto orgânico dissolvido lábil.

Por sua vez, a decomposição do azoto orgânico particulado produz amónia e azoto orgânico dissolvido refractário ou não lábil. A remineralização do azoto orgânico dissolvido a amónia só é conseguida, no caso refractário, numa escala temporal de anos. O processo da nitrificação é constituído pela transformação da amónia em nitrito, e, posteriormente, em nitrato.

Não é considerada no modelo a fixação atmosférica de azoto; a geralmente pequena importância da fixação de N_2 em estuários relativamente a ambientes de água doce justifica a não inclusão deste termo nas equações da amónia, para o caso do estuário do Tejo. Por seu lado, a perda de azoto através do consumo sucessivo pelos níveis tróficos superiores e o azoto molecular produzido durante a desnitrificação constituem sumidouros de azoto no modelo.

O modelo de qualidade da água foi desenvolvido em termos de fontes/poços calculados para cada propriedade, traduzindo a sua variação devido aos processos biológicos e químicos mais relevantes que ocorrem na coluna de água. Apresenta-se em anexo as equações e uma descrição mais exaustiva do algoritmo.

7.1 - Fitoplâncton

A única forma de produção primária considerada neste modelo é a fotossíntese fitoplanctónica, sendo o termo de fonte/poço para o fitoplâncton dado por:

$$\frac{dF}{dt} = (\mu - r - e_x - s - m)F,$$

onde F é a concentração de fitoplâncton(mg C I^{-1}), μ a taxa bruta de crescimento fitoplanctónico (dia⁻¹), r a taxa de respiração (dia⁻¹), e_x a taxa de excreção (dia⁻¹) e m a mortalidade não predatória (dia⁻¹).

A taxa de crescimento de uma população de fitoplâncton num ambiente natural é uma função das espécies de fitoplâncton presentes e das suas diferentes reacções às condições de temperatura, luz e disponibilidade de nutrientes necessários (azoto). Encontram-se disponíveis em EPA (1985) várias expressões matemáticas traduzindo as limitações de luz-nutrientes no crescimento do fitoplâncton. A taxa bruta de crescimento do fitoplâncton é dada por:

$$\mu = \mu_{\max} (T_{ref}) \Psi(T) \Psi(L) \Psi(N)$$

onde $\mu_{max}(T_{ref})$ (dia⁻¹) representa a taxa fotossintética ou de crescimento fitoplânctónico máxima a uma dada temperatura de referência (normalmente, $T_{ref} = 20$ °C) e em condições óptimas de intensidade luminosa e disponibilidade de nutrientes. EPA recomenda a utilização de $\mu_{max}(20^{\circ}C)$ entre 1.0 e 2.7 dia⁻¹. $\Psi(L)$ é a função que traduz o efeito limitante da intensidade luminosa. $\Psi(T)$ traduz o efeito da temperatura no crescimento do fitoplâncton, dado por:

$$\Psi(T) = K_A(T) \ K_B(T)$$

onde

$$K_{A}(T) = \frac{k_{1} e^{\gamma_{1}(T - T_{\min})}}{1 + k_{1} \left[e^{\gamma_{1}(T - T_{\min})} - 1 \right]}, \ \gamma_{1} = \frac{1}{\left[T_{opt(1)} - T_{\min} \right]} \ln \left[\frac{k_{2} \left(1 - k_{1} \right)}{k_{1} \left(1 - k_{2} \right)} \right],$$

$$K_{B}(T) = \frac{k_{4} e^{\gamma_{2} (T_{\max} - T)}}{1 + k_{4} \left[e^{\gamma_{2} (T_{\max} - T)} - 1 \right]}, \ \gamma_{2} = \frac{1}{\left[T_{\max} - T_{opt(2)} \right]} \ln \left[\frac{k_{3} (1 - k_{4})}{k_{4} (1 - k_{3})} \right].$$

Nas equações acima, $T_{opt(1)}$ é o valor mínimo do intervalo óptimo de temperatura para o crescimento do fitoplâncton, sendo $T_{opt(2)}$ o máximo. T_{min} é a temperatura mínima tolerável pelo fitoplâncton (sendo a sua taxa de crescimento nula a esta temperatura),

enquanto que T_{max} é a temperatura máxima tolerável. As restantes constantes servem para controlar a forma da curva de resposta.

O efeito limitante do azoto (N), $\Psi(N)$, é calculado com base na cinética de assimilação de Michaelis-Menten. Na zona costeira portuguesa, considera-se o azoto, na sua forma inorgânica dissolvida (azoto amoniacal e nitratos), como o principal nutriente limitante da produção primária:

$$\Psi(N) = \frac{\left[NH_4^{+} + NO_3^{-}\right]}{k_N + \left[NH_4^{+} + NO_3^{-}\right]},$$

onde k_N é a constante de semi-saturação para o azoto, i.e., é a constante que representa a concentração de substrato para a qual $\Psi(N)=1/2$ e, de acordo com EPA, $K_N=0.025$ mg N l⁻¹. $\left[NH_4^{+}+NO_3^{-}\right]$ representa a concentração das formas de azoto inorgânico dissolvido, amónia e nitrato (mg N l⁻¹).

O efeito limitante da intensidade luminosa $\Psi(L)$ é modulado de acordo com a formulação de Steele (1962), sendo o seu valor calculado fora do modelo de qualidade da água (secção 6.4.4).

A respiração é o processo inverso da fotossíntese, e como tal contribui para a redução da biomassa do fitoplâncton, sendo libertados azoto e fósforo. A respiração r (dia⁻¹) pode ser dividida em respiração endógena (ou basal) e fotorrespiração:

r=r_e+r_p,

sendo r_e a respiração endógena e r_p a fotorrespiração.

$$r_e = K_{er} e^{0,069 T}$$

onde k_{er} é a constante da respiração endógena do fitoplâncton, k_{er} = 0.0175, e T é a temperatura (°C). A fotorrespiração é proporcional à taxa fotossintética:

$$r_p = k_p \mu$$

sendo k_p o factor de proporcionalidade.

Em relação à excreção e_x (dia⁻¹), atendendo a que esta, ao inverso do que se passa com a fotossíntese, é superior quando os níveis de radiação solar são ou muito baixos ou muito altos, a determinação das perdas por excreção faz-se através de:

$$e_{X} = k_{e} \left(1 - \Psi(L) \right) \mu,$$

onde *k*_e é uma constante adimensional.

A mortalidade não predatória m (dia⁻¹) do fitoplâncton inclui processos tais como a senescência, a decomposição bacteriana das células vegetais (parasitismo) e a mortalidade induzida pelas tensões ambientais (deficiências nutritivas severas, condições ambientais extremas, presença de substâncias tóxicas no ambiente). Considera-se proporcional à biomassa de fitoplâncton e inversamente proporcional à taxa de crescimento bruto μ :

$$m(T_{ref}) = m_{max} (T_{ref}) \left(\frac{F / \mu}{k_m + F / \mu} \right),$$

onde k_m é uma constante de semi-saturação para a mortalidade (mg C dia⁻¹ Γ^1) e $m_{max}(T_{ref})$ é a taxa máxima de mortalidade a uma temperatura de referência T_{ref} . EPA sugere uma taxa de mortalidade não-predatória para o fitoplâncton entre 0.005 e 0.17 mg C dia⁻¹ Γ^1 .

7.2 - Zooplâncton

O termo de fonte/poço do zooplâncton pode ser representado por:

$$\mathbf{S}_{z} = \left(\mathbf{g}_{z} - \mathbf{r}_{z} - \mathbf{m}_{z}\right)\mathbf{Z} - \mathbf{G}_{z},$$

onde Z representa a concentração de zooplâncton (mg C I^{-1}), g_z a taxa bruta de crescimento do zooplâncton (dia⁻¹), r_z a taxa de perda de biomassa por respiração e excreção, m_z a taxa de mortalidade não-predatória (dia⁻¹), e G_z a mortalidade predatória (mg C I^{-1} dia⁻¹).

A taxa bruta de crescimento do zooplâncton, g_Z (dia ⁻¹), é obtida a partir de:

$$g_z = g_{max}(T_{ref}) \Psi(T) \left(1 - e^{-\Lambda \left(F - F_o\right)}\right)$$

onde $g_{max}(T)$ é a taxa máxima de crescimento do zooplâncton à temperatura de referência e com abundância de alimento, em que para uma $T_{ref} = 20^{\circ}C$, $g_{max}(T)$ varia entre 0.1 e 0.3 dia⁻¹. Λ é a constante de lvlev para o pastoreio herbívoro, sendo considerada igual a 1.6. F é a concentração de fitoplâncton (mg C l^{-1}), F_0 é a concentração mínima de fitoplâncton para a ocorrência de pastoreio pelo zooplâncton, e $\Psi(T)$ representa o efeito da temperatura no crescimento do zooplâncton.

A respiração e a mortalidade não predatória do zooplâncton são consideradas funções da temperatura, sendo tratadas como uma variável:

 $r_z + m_z = d_z(T_{ref})\Psi(T)$

onde $d_z(T_{ref})$ é a taxa de consumo de carbono por respiração e mortalidade não predatória à temperatura de referência, $\Psi_r(T)$ representa a influência da temperatura.

A mortalidade predatória do zooplâncton, G_z, depende da concentração do zooplâncton:

 $G_z = e_z Z$,

onde e_z representa a taxa de mortalidade predatória (dia⁻¹).

7.3 - Azoto

A concentração das várias formas de azoto é simulada pelo modelo através da resolução de um sistema de 6 equações, correspondendo cada equação a cada uma das formas de azoto consideradas: amónia (NH₄⁺), nitrato (NO₃⁻), nitrito (NO₂⁻), azoto orgânico particulado (PON), azoto orgânico dissolvido refractário (DONr) e a fracção não-refractária do azoto orgânico dissolvido(DONnr):

$$S_{NH_{4}^{+}} = f_{1N}e_{NF} - \Phi_{NH_{4}^{+}} - k_{2N}NH_{4}^{+} + k_{1Nnr}DONnr + k_{1Nr}DONr + f_{2}k_{det}PON$$

$$S_{NO_2^-} = k_{2N}NH_4^+ - k_{2N}NO_2^-$$

$$S_{NO_{2}^{-}} = k_{2N} NO_{2}^{-} - \Phi_{NO_{2}^{-}} - k_{3N} NO_{3}^{-}$$

$$S_{PON} = (1 - f_D)(1 - f_{1N})(e_{NF} + e_{NZ}) - k_{det}PON + mF\alpha_{N:C} + g_Z Z\alpha_{NZ} \left(\frac{1 - E}{E}\right) + g_Z Z(\alpha_{N:C} - \alpha_{NZ})$$

 $S_{DONnr} = f_{D} (1 - f_{1N}) e_{NF} - k_{1N} DONnr$

 $S_{DONr} = k_{det} PON(1 - f_2) - k_{1Nr} DONr$

onde f_{1N} é a fracção inorgânica das excreções do plâncton, f_D é a fracção inorgânica dissolvida das excreções do plâncton. e_{NF} (mg N Γ^1 dia⁻¹) é a taxa de excreção de compostos solúveis de azoto pelo fitoplâncton. k_{1N} (dia⁻¹) é a taxa de hidrólise do DONnr, k_{2N} (dia⁻¹) é a taxa de nitrificação, k_{3N} (dia⁻¹) a taxa de desnitrificação e k_{det} (dia⁻¹) é a taxa de decomposição de compostos orgânicos particulados de azoto. $\alpha_{N:C}$ (mg N mg C⁻¹) representa a razão azoto:carbono na composição elementar do fitoplâncton. Φ_{NH4+} (mg N Γ^1 dia⁻¹) representa a taxa de assimilação fotossintética de amónia. Φ_{NO3-} (mg N Γ^1 dia⁻¹) representa a taxa de assimilação fotossintética de nitrato. Os três últimos termos da equação 4 representam, respectivamente, a mortalidade do fitoplâncton, a fracção não assimilada de fitoplâncton no pastoreio e as perdas estequiométricas na cadeia alimentar.

A taxa de hidrólise do DON, k_{1N}, é dada por:

$$k_{1N} = M_{DON} \left(T_{ref} \right) \theta_{DON}^{(T-T_{ref})}$$

onde $M_{DON}(T_{ref})$ (dia⁻¹)é a taxa de decomposição de referência e θ_{DON} é o coeficiente da temperatura.

A taxa de nitrificação, k_{2N}, é dada por:

$$k_{2N} = M_{NH_4^+} \left(T_{ref} \right) \theta_{NH_4^+}^{(T-T_{ref})} \left(\frac{O_2}{k_n + O_2} \right).$$

onde $M_{NH4+}(T_{ref})$ (dia⁻¹) é a taxa de nitrificação de referência, θ_{NH4+} é o coeficiente de temperatura, k_n (mg O₂ Γ^1) é a constante de semi-saturação da nitrificação e O₂ é a concentração de oxigénio (mg O₂ Γ^1).Para a temperatura de referência usual de 20°C,

$$M_{_{NH_{4}^{+}}}(20^{\circ}C) = 0.10 dia^{-1}$$
, $\theta_{_{NH_{4}^{+}}} = 1.080 \text{ e}^{k_{_{n}}} = 2.0 mg \text{ O}_{2} \text{ }^{1^{-1}}$ são os valores considerados.

A taxa de desnitrificação, k_{3N} , é dada por:

$$k_{3N} = M_{NO_{3}^{-}} \left(T_{ref} \right) \theta_{NO_{3}^{-}}^{(T-T_{ref})} \left(\frac{k_{d}}{k_{d} + O_{2}} \right)$$

onde $M_{\text{NO3-}}(T_{\text{ref}})$ (dia⁻¹) é a taxa de desnitrificação de referência, $\theta_{\text{NO3-}}$ é o temperatura, $k_d \pmod{O_2} \Gamma^1$ é a constante de semi-saturação da desnitrificação e O_2 é a concentração de oxigénio (mg $O_2 \Gamma^1$). Para a temperatura de referência usual de 20°C, $M_{NO_3^-}(20^{\circ} C) = 0.10 dia^{-1}, \theta_{O_3^-} = 1.080$ e $k_d = 0.1 mg O_2 \Gamma^1$ são os valores considerados.

A taxa de decomposição de compostos orgânicos particulados de azoto , $k_{\mbox{\tiny det}}$, é dada por:

$$k_{\text{det}} = M_{PON} \left(T_{ref} \right) \theta_{PON}^{(T-T_{ref})}$$

onde $M_{PON}(T_{ref})$ (dia⁻¹)é a taxa de decomposição de referência e θ_{PON} é o coeficiente de temperatura .

A taxa de excreção de compostos azotados solúveis pelo fitoplâncton, e_{NF} (mg N I^{-1} dia⁻¹) é dada por:

$$e_{NF} = \alpha_{N:C} \left(r + e_x \right) F$$

sendo $\alpha_{N:C}$ a fracção de azoto contida nas células de fitoplâncton (mg N mg C⁻¹), a taxa de respiração do fitoplâncton (dia⁻¹), e_x a taxa de excreção do fitoplâncton (dia⁻¹).

O consumo directo dos nutrientes pelo fitoplâncton faz-se apenas quando aqueles se encontram na forma inorgânica dissolvida, ou seja, no caso do azoto sob a forma de amónia ou de nitrato, demonstrando-se preferência pela forma amoniacal, sendo o nitrato consumido apenas na ausência desta. As taxas de assimilação fotossintética de amónia , ϕ_{NH4+} e de nitrato, ϕ_{NO3-} , são dadas respectivamente por :

$$\Phi_{_{NH_4^+}} = \beta_{_{NH_4^+}} \alpha_{_{N:C}} \mu F$$

е

$$\Phi_{NO_3^-} = \left(1 - \beta_{NH_4^+}\right) \alpha_{N:C} \mu F$$

onde β_{NH4+} é o factor de preferência pelo ião amónio e $\alpha_{N:C}$ representa a fracção de azoto contida nas células de fitoplâncton (mg N/mg C), sendo:

$$\beta_{NH_4^+} = \frac{NH_4^+ \cdot NO_3^-}{\left(k_N + NH_4^+\right)\left(k_N + NO_3^-\right)} + \frac{NH_4^+ \cdot k_N}{\left(NH_4^+ + NO_3^-\right)\left(k_N + NO_3^-\right)}$$

onde k_N é a já mencionada constante de semi-saturação do azoto, considerando-se um valor de k_N =0.025mg N Γ^1 .

O modelo de qualidade calcula sempre a concentração de oxigénio dissolvido; no caso de tal não ser expressamente pedido pelo utilizador, o modelo calcula a concentração de saturação.

A concentração de saturação do oxigénio, O2 sat (mg O2 l⁻¹) :

$$O_{2}\Big|_{sat} = \exp\left\{-139.344\ 11 + \frac{1.575\ 701 \times 10^{5}}{T(K)} - \frac{6.642\ 308 \times 10^{7}}{T(K)^{2}} + \frac{1.243\ 800 \times 10^{10}}{T(K)^{3}} - \frac{8.621\ 949 \times 10^{11}}{T(K)^{4}} - C_{cl}\left(3.1929 \times 10^{-2} - \frac{19.428}{T(K)} + \frac{3.8673 \times 10^{3}}{T(K)^{2}}\right)\right\}$$

onde C_{cl} é a clorinidade da água (p.p.t.) e S a salinidade (p.p.t.).

$$C_{cl} = \frac{S}{1.806\ 55}$$

8 - INTERFACES

Para facilitar a utilização do sistema MOHID foi desenvolvido uma interface gráfica num ambiente *Windows*. Esta interface permite ao utilizador gerir os dados de entrada do sistema MOHID, executar o programa e analisar os resultados produzidos por ele. Este capítulo descreve as principais potencialidades da interface gráfica, que se podem dividir em três partes: o pré-processamento dos dados de entrada do modelo, a execução do modelo e o pós-processamento.

8.1 - Pré-processamento

O sistema MOHID precisa vários ficheiros de dados de entrada para executar uma corrida. Cada ficheiro contêm as opções de cálculo para um dado módulo do programa. Cada simulação, que o utilizador pretende executar, pode ser constituída por uma ou várias corridas. Torna-se então necessário de organizar os dados de entrada do modelo duma maneira simples, que permite ao utilizador gerir com facilidade a informação de todos os dados de entrada.

8.1.1 - Organização hierárquica

A interface gráfica do sistema MOHID permite organizar toda a informação numa maneira hierárquica, de um modo muito parecido com o "*Windows Explorer*". No topo da hierarquia existe "*o Projecto*". Cada projecto é constituído por uma ou várias simulações. Estas simulações são todas independentes uma das outras, tendo em comum o facto de pertencerem todas ao mesmo projecto.

Cada simulação é caracterizada por uma batimetria e pode ser constituída por uma ou várias corridas. Por sua vez, cada corrida pode ter um ou mais corridas "filho". Uma corrida "filho" é inicializada com as condições finais da corrida "pai", ou seja é uma sequência temporal, da corrida "pai". Corridas com o mesmo pai que correm em paralelo distinguem-se em termos de parâmetros mas têm em comum o facto de partirem das mesmas condições iniciais.

Existe uma organização hierárquica com as seguintes características: O projecto é chamado *Tagus* e é constituído por duas simulações, uma chamada *Tejo_Fine_Grid* e outra chamada *Tejo_Large_Grid*. Cada uma das simulações contém três corridas, uma corrida inicial para a estabilização do modelo e de seguida duas corridas em paralelo, uma corrida sobre condições de vento Norte, outra sobre condições de vento Sul.

Wohid 2000 - Preprocessing Mode			
Mohid 2000 - Preprocessing Mode Project Iree Execute Mode Help Tagus Tagus Tejo_Fine_Grid Bathymety Stabilization NorthWind SouthWind Executable Bathymety Bathymety Down B	Dption Model Hychodynamic Bottom Surface Geometry WaterProperties Turbulence	Status OK ? OK OK ? OK OK	DataFile E:\Aplica\Tejo\Tejo_Fi E:\Aplica\Tejo\Tejo_Fi E:\Aplica\Tejo\Tejo_Fi E:\Aplica\Tejo\Tejo_Fi E:\Aplica\Tejo\Tejo_Fi E:\Aplica\Tejo\Tejo_Fi E:\Aplica\Tejo\Tejo_Fi
Call NorthWind	-		×

Figura 7 - Organização hierárquica das corridas no sistema MOHID.

Quando o utilizador clicar sobre um ícone na lista da direita da janela da Figura anterior as opções de cálculo, podem ser introduzidas através de caixas de diálogo, como mostra a Figura seguinte:

Hydrodynamic Options	X
Numerical Options Boundary Conditions Output	
Forcing Options	
🗖 Baroclinic 🔽 Coriolis	
Horizontal Diffusion	
Horizontal Convection	
Additional Compute Uptions	
Upwind C Quick C Abbott Leendertse	
Hydrodynamic Solution	
OKCancel	

Figura 8 - Caixa de diálogo para especificar opções de cálculo.

8.1.2 - Visualização da batimetria

A batimetria é um dado fundamental para cada simulação. A interface gráfica permite ao utilizador do sistema MOHID trabalhar sobre a batimetria em duas formas. Por um lado permite alterar a próprio batimetria, ou seja mudar localmente a profundidade, e por outro lado permite ao utilizador definir caixas ou pontos sobre a batimetria.

A alteração da batimetria pode ser útil, quando se conhecem novos dados batimétricos, ou quando se pretende estudar o impacte de dragagens numa dada região. A definição de pontos e de caixa é importante para a definição de pontos de séries temporais, de caixas de monitorização e/ou a localização de descargas. Na Figura seguinte é representado um exemplo com o estuário do Tejo.



Figura 9 - Pré-processamento sobre a batimetria no sistema MOHID.

8.2 - Execução do modelo

Após a especificação de todos os dados necessários para a execução do modelo, o utilizador tem a hipótese de criar um ficheiro de comando que executa uma ou várias corridas de um projecto. Após a criação desse ficheiro de comandos é possível executar o a partir da interface gráfica do sistema MOHID.

8.3 - Pós-processamento

Após a execução do modelo é necessário analisar os resultados produzidos pelo mesmo. Para esse fim, a interface gráfica do sistema MOHID, integra um pósprocessamento. Para o activar, o utilizador necessita somente mudar do modo préprocessamento para o modo pós-processamento. O aspecto da janela principal da interface gráfica permanece o mesmo só que na coluna da direita, aparece agora uma lista dos ficheiro de resultados produzidos pelo modelo. Esta organização permite ao utilizador manter a mesma estrutura de ficheiros nos dois modos.

Ao clicar sobre um ficheiro de resultados, o pós-processador analisa os conteúdos desse ficheiro e abre uma janela com as estruturas de resultados contidos nesse ficheiro. A partir dos resultados obtidos, o utilizador tem a hipótese de seleccionar a informação que pretende visualizar. O pós-processador do sistema MOHID é capaz de produzir vários tipos figuras a partir dos resultados, nomeadamente campos de cores, isolinhas, vectores e partículas lagrangianas. Um utilitário chamado "Sequencer" permite ao utilizador avançar pelos resultados passo à passo ou sob a forma de animações contínuas. A Figura seguinte mostra a selecção dos resultados e a obtenção de uma figura final (batimetria esquemática).



Figura 10 - Análise e visualização dos resultados obtidos no sistema MOHID.

8.4 - Ferramentas para análise de resultados

O objectivo de um modelo é calcular a variação temporal e espacial de uma ou várias propriedades num determinado domínio. A situação ideal em termos de análise de resultados é integrar ambas as perspectivas (variação temporal e espacial) sem perda de informação vital.

Normalmente quando se pretende estudar a variação temporal de uma determinada propriedade, calcula-se uma série temporal num ponto do domínio. Contudo surge a questão se a ponto escolhido é representativo da área onde está inserido sendo portanto difícil a extrapolação para a variação espacial da propriedade.

Por outro lado melhor maneira de observar a variação espacial é graficar o campo de concentrações da propriedade num determinado instante de tempo. Juntando vários mapas de instantes de tempo é possível obter uma sequência onde se visualiza a variação temporal e espacial da propriedade. Apesar deste resultado ser já bastante satisfatório, pode ainda não ser o ideal se o objectivo for estudar as características de uma zona particular no domínio. Nesse caso a solução deve passar pela definição e integração dos resultados em zonas de maior interesse, quer em termos espaciais quer em termos temporais. Esta conclusão leva-nos ao conceito de caixas de integração. Com este método implementado no sistema MOHID 2000, é possível não só calcular o valor médio da propriedade nas zonas definidas pelas caixas como também calcular os fluxos entre caixas.



Figura 11 - Variação temporal da concentração de sedimentos



Figura 12 - Variação espacial da concentração de sedimentos



Figura 13 - Fluxos de sedimentos entre caixas e com a plataforma costeira ao longo de 6 meses.

9 - Referências

ALLEN, C. M., 1982. Numerical simulation of contaminant dispersion in estuary flows. Proc. R. Soc. London. A 381, 179-194 (1982).

BECKERS, J. M., 1991. Application of the GHER 3D General Circulation Model to the Western Mediterranean. J. Marine Systems, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, 1: 315-332.

BLUMBERG, A. F. E G. L. MELLOR, 1987: A description of a three-dimensional coastal ocean model. Three-Dimensional Coastal Ocean Models, N. Heaps, Ed., Coastal Estuarine Science, Vol. 4, Amer. Geophys. Union, 1-16.

BURCHARD, H., K. BOLDING E M. R. VILLAREAL, 1999: GOTM, a General Ocean Turbulence Model. Theory, implementation and test cases. Rep. of EC, EUR 18745 EN.

COELHO, H. S., 1996. Modelação Numérica da Turbulência Oceânica. Dissertação para a obtenção do grau de Mestre em Ecologia, Gestão e Modelação dos Recursos Marinhos apresentada ao Instituto Superior Técnico, Lisboa.

COELHO, H. S., R. J. J. NEVES, P. C. LEITÃO, H. MARTINS AND A. SANTOS, 1999: The slope current along the Western European Margin: a numerical investigation. *Bol. Inst. Esp. Oceanogr.*, 15, 61-72

FISCHER, H. B., LIST, E. J., KOH, R. C. Y., IMBERGER, J. E BROOKS, N. H., 1979. Mixing in Inland and Coastal Waters. Academic Press, New York, U.S.A., 483p.

MARTINS, F. A., P. C. LEITÃO, A. SILVA AND R. NEVES, *in press*: 3D modelling of the Sado Estuary using a new generic vertical discretization approach. Accepted for publication in *Oceanologica Acta*.

MARTINS, F.A., R.J. NEVES, P.C. LEITÃO, 1998. A three-dimensional hydrodynamic model with generic vertical coordinate. *Proceedings of Hidroinformatics98, 2, V. Babovic and L. C. Larsen eds.*, Balkerna/Rotterdam, Copenhague, Denmark, August 1998.1403-1410

MELLOR, G. L., S. HAKKINEN, T. EZER E R. PATCHEN, 2000: A Generalization of a Sigma Coordinate Ocean Model and an Intercomparison of Model Vertical Grids. Submitted to Ocean Forecasting: Theory and Practice, N. Pinardi (Ed.), Springer-Verlag Publ.

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

MIRANDA, R.C., (1997). Nitrogen biogeochimical cycle modelling in the North Atlantic Ocean. Universidate Técnica de Lisboa, Intituto Superior Tecnico, Dezembro 1997.

MONTEIRO, A. J., 1995. Dispersão de Efluentes Através de Exutores Submarinos. Uma contribuição para a modelação matemática. Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

NEVES, R. J. J., 1985. Étude Expérimentale et Modélisation Mathématique des Circulations Transitoire et Résiduelle dans l'Estuaire du Sado. Ph.D.. Thesis, University of Liège (Belgium).

OZMIDOV, R. V., 1990. Diffusion of Contaminants in the Ocean. Oceanographic Sciences Library, Kluwer Academic Publishers, 283 p.

RIJN, L. C., 1989. Handbook of Sediment Transport by Currents and Waves. Delft Hydraulics, Report H 461, June 1989.

RODRIGUES, V., Neves, R. J. J. & MIRANDA, R., 1996. Modelação ecológica e da qualidade da água em zonas costeiras. 5^ª Conferência Nacional sobre a Qualidade do Ambiente, Aveiro.

SANTOS, A. J., 1995. Modelo Hidrodinâmico Tridimensional de Circulação Oceânica e Estuarina. Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

SANTOS, A. J. & R. NEVES, 1991. Radiative Artificial Boundaries in Ocean Barotropic Models. In: A. S. Arcilla, Ed., Proceedings of the 2nd Int. Conf. on Computer Modelling in Ocean Engineering, Barcelona, p. 373-383.

SULLIVAN, P. J., 1971. Longitudinal dispersion within a two-dimensional turbulent shear flow. Journal Fluid Mech., vol. 49, part 3, pp. 551-576 (1971).

TABOADA, J. J., R. PREGO, <u>M. RUIZ-VILLARREAL</u>, M. GÓMEZ-GESTEIRA, P. MONTERO, <u>A.</u> <u>P. SANTOS</u>, V. PÉREZ-VILLAR, 1998: Evaluation of the Seasonal Variations in the Residual Circulation in the Ria of Vigo (NW Spain) by means of a 3D baroclinic model. Estuarine, Coastal and Shelf Science.

U.S. EPA (1985) - Rates, constants, and kinetics formulations in surface water quality modeling (2nd. ed.). United States Environmental Protection Agency, Report EPA/600/3-85/040.

10 - EXEMPLOS DE APLICAÇÕES



Figura 14 - Análise de risco de quadra de bóias no Algarve – Sul de Portugal





Figura 15 e 16 - Resultados de derrames de hidrocarbonetos no Porto de Leixões – Visualização no Sistema de Informação Geográfica AutoCAD Map



Figura 17 - Costa Portuguesa – Simulação da corrente superficial ao longo da Costa Portuguesa forçada com densidade climatológica e com ventos e fluxos de calor fornecidos pelo Centro Europeu para o mês de Fevereiro de 1994 (Organismo responsável pela previsão atmosférica no continente Europeu)





Figura 18 - Sistema lagunar do Mussulo – simulação da hidrodinâmica local

Figura 19 - Estuário do Sado – simulação da hidrodinâmica com base no modelo baroclínico tridimensional



Figura 20 - Estuário do Tejo – Simulação dos percursos efectuados pelas massas de água rejeitadas nas ribeiras da costa do Estoril.



Figura 21 - Estuário de Santos – emissão de traçadores lagrangeanos em diferentes pontos para avaliação das condições de dispersão locais





Figura 22 e 23 - Projecto OMEX – simulação do upwelling sobre a plataforma. Comparação dos resultados do modelo com medidas efectuadas por Satélite.



Figura 24 - Estuário da Paraíba – Avaliação dos trajectos das massas de água do estuário



Figura 25 - Estuário do Sado – simulação do campo de salinidade



Figura 26 - Estuário do Douro – transporte de sedimentos por acção combinada de ondas e correntes



Figura 27 e 28 - Porto de Peniche – Simulação da agitação local

ANEXO IIB

Dispersão de Efluentes Atmosféricos – Modelização



DEFINIÇÃO DE ÂMBITO DO ESTUDO DE IMPACTE AMBIENTAL DA CENTRAL DE CICLO COMBINADO DO SUL



1. AVALIAÇÃO DE IMPACTE AMBIENTAL E DISPERSÃO DE POLUENTES MEIOS DE SOFTWARE DISPONIVEIS:

1.1. PROGRAMA TCM2B - TEXAS CLIMATOLOGICAL MODEL, VERSÃO 2B

Programa de cálculo automático de dispersão de poluentes utilizando um modelo aprovado pela USEPA que é um modelo gaussiano que, a partir de um cenário meteorológico em termos de função conjunta de probabilidades de dados de direcção e velocidades dos ventos e classes de estabilidade da atmosfera cf, Pasquill Guilford e de dados de emissões de fontes estacionárias múltiplas permite a previsão das concentrações de poluentes ao nível do solo no longo termo.

Este programa foi já avaliado pela DGA e pelo ISQ e utilizado, com sucesso, em diversos estudos e de implantação de redes de qualidade do ar de complexos febris da indústria cimenteira, estudos de impacte ambientar de centrais térmicas, pedreiras, etc.

Bibliografia:

"User's guide to the Texas Climatological Model", Texas Air Control Board, 1 9SU

- "User's manual for TCM2B", Trinity Consulants Inc., 1987

- "TCM-Manual do Utilizador", Direcção Geral da Qualidade do Ambiente, Lisboa, 1989

Gomes, J.F.P., "Estudos de implantação de redes de qualidade do ar por aplicação de modelos de dispersão", Proc. da 1a Conferência Nacional sobre Qualidade do Ambiente, Aveiro, 1988, pp.376/381

Gomes, J.F.P., "Estudos de implantação de redes de qualidade do ar", comunicação apresentada nas I.' Jornadas Técnicas de Engenharia Mecanica da Ordem dos Engenheiros, Lisboa, 1988

Gomes, J.F.P., "Protecção do Ambiente e Impacte Ambiental", Ingenium, 64, 44/55, 1992

1.2. PROGRAMA PTPLU2 - POINT PLUME, VERSÃO 2

Programa de cálculo automático de poluentes utilizando um modelo aprovado pela USEPA que é um modelo gaussiano que, a partir de dados de emissões de fontes estacionárias simples e para diversas classes de estabilidade da atmosfera cf. Pasquill/Guilford, permite a previsão de concentrações máximas de poluentes ao nível do solo no longo termo.

Este programa foi avaliado pelo ISQ e utilizado com sucesso em estudos de dispersão e avaliação de impacte ambientar de fontes emissoras em diversas situações.

Bibliografia:: "PTPLU-2 User's guide", USEPA, 1986 "User's Manual for PTPLU2", Trinity Consultants Inc., 1987

1.3. PROGRAMA STAR/WINDROSE

Programa de cálculo automático de funções conjuntas de frequências meteorológicas e classes de dispersão a partir de observações "brutas" de dados meteorológicos.

Utilizado na construção de funções de dados a serem utilizadas pelo programa TCM2B.

Bibliografia:

"User's manual for Star/Windrose", Trinity Consultants, Inc. 1988

1.4. PROGRAMA PUFFPLU - EMISSION OF PUFF PLUMES:

Programa de previsão de percurso e área afectada pela libertação súbita de gases na atmosfera utilizando um modelo gaussiano aprovado pela USEPA.

Programa avaliado pelo ISQ em diversas situações de acidente industrial.

Bibliografia:

"User's manual for Puffplu", Trinity Consultants, Inc., 1986

2. LISTAGEM DOS PRINCIPAIS ESTUDOS DE IMPACTE AMBIENTAL EFECTUADOS:

SECIL, Estudo de impacte ambientar de complexo cimenteiro e implementação de rede de qualidade do ar, Setúbal, 1987;

CIMPOR, Estudo de impacte ambientar de complexo cimenteiro e implantação de rede de qualidade do ar, Alhandra, 1989;

SILOPOR, Estudo de impacte ambientar de terminal cerealífero, Trafaria, 1989/90 1 1993;

GEOMETRAL, Estudos de impacte ambientar de duas pedreiras, Amadora, 1991; CIMPOR, Estudo de impacte ambientar de instalação de moagem, Maceira, 1992; CIMPOR, Estudo de impacte ambientar de instalação de paletização, Alhandra, 1992

SAPEC, Estudo de impacte ambientar de complexo adubeiro, Setúbal, 1992/93 TAGOL, Estudo de impacte ambientar de terminal cerealifero, Almada, 1993;

CIMENTOS MACEIRA E PATAIAS, Estudo de impacte ambientar do complexo cimenteiro e implantação de rede de qualidade do ar, Maceira do Liz, 1993/94

CIMENTOS MACEIRA E PATAIAS, Estudo de impacte ambientar do complexo cimenteiro e implementação de rede de qualidade do ar, Pataias, 1994;

NAVICAR, Estudo de impacte ambientar, Palmela, 1993/94;

PROLIXO, Estudo de impacte ambientar de unidade de incineração, Barreiro, 1994;

CELBI, Estudo de impacte ambientar e implantação de rede de qualidade do ar, Figueira da Foz, 1995;

SN LONGOS, Estudo de dispersão de poluentes e cálculo de altura das chaminés da Unidade Fabril da Maia, 1998.

ANEXO III

Desenhos



DEFINIÇÃO DE ÂMBITO DO ESTUDO DE IMPACTE AMBIENTAL DA CENTRAL DE CICLO COMBINADO DO SUL







Desenho nº 500-003