

MOHID

DESCRIÇÃO *do* MOHID

MARETEC
Instituto Superior Técnico
Universidade Técnica de Lisboa

MOHID

DESCRIÇÃO *do* MOHID

MARETEC
Instituto Superior Técnico
Universidade Técnica de Lisboa
<http://www.mohid.com/>

Tradução para língua portuguesa
Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues

Revisão da tradução para língua portuguesa
Edson Carlos Nascimento

Revisão técnica
Jader Lugon Junior



Campos dos Goytacazes
2012

Ministério da Educação
Secretaria de Educação Profissional e Tecnológica
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Fluminense

Reitor

Pró-Reitor de Ensino

Pró-Reitor de Pesquisa e Inovação

Pró-Reitor de Administração

Pró-Reitora de Extensão

Conselho Editorial

Luiz Augusto Caldas Pereira

Carlos Márcio Lima

José Augusto Ferreira da Silva

Amaro Falquer

Paula Aparecida Martins Borges

Desiely Silva Gusmão

Edinalda Almeida da Silva

Helvia Pereira Pinto Bastos

Jefferson Manhães de Azevedo

Luiz de Pinedo Quinto Junior

Maria Amélia Ayd Corrêa

Maria Inês Paes Ferreira

Pedro de Azevedo Castelo Branco

Regina Coeli Martins Aquino

Rogério Atem de Carvalho

Romeu e Silva Neto

Said Sérgio Martins Auatt

Salvador Tavares

Sergio Vasconcelos

Silvia Lúcia dos Santos Barreto

Synthio Vieira de Almeida

Vania Cristina Alexandrino Bernardo

Vicente de Paulo Santos Oliveira

Wander Gomes Ney

Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues

Edson Carlos Nascimento

Jader Lugon Junior

Paloma Gomes

Bianca Cordeiro Freire

Haydda Manolla Chaves da Hora

André da Silva Cruz

Inez Barcellos de Andrade

Tradução para língua portuguesa

Revisão da tradução para língua portuguesa

Revisão técnica

Adaptação das figuras

Capa, Projeto Gráfico e Diagramação

Catálogo e Revisão das normas ABNT

D449 Descrição do MOHID / MARETEC, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa; tradução de Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues; revisão da tradução para língua portuguesa Edson Carlos Nascimento; revisão técnica Jader Lugon Junior. -- Campos dos Goytacazes (RJ): Essentia Editora, 2012.

130 p. : il.

ISBN Versão eletrônica : 978-85-99968-20-8

Tradução de: MOHID Modelling System Description.

1. Água - Modelagem matemática. 2. Programa de computador. 3. Interface gráfica. I. MARETEC, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa. II. Rodrigues, Pedro Paulo Gomes Watts, trad. III. Nascimento, Edson Carlos, rev.trad. IV. Título.

CDD - 551.48

Copyright * by Essentia Editora

Essentia Editora

Rua Dr. Siqueira, 273

Bloco A - sala 28 - Pq. Dom Bosco

Campos dos Goytacazes/RJ - CEP 28030-130

Tel.: (22) 2726-2882 | fax (22) 2733-3079

www.essentiaeditora.iff.edu.br

essentia@iff.edu.br

SUMÁRIO

1 VISÃO GERAL	9
1.1 Introdução	9
1.2 Histórico	10
1.3 Estágio Atual	10
1.4 Aplicações	12
2 MÓDULO MODELO	15
2.1 Introdução	15
2.2 Execução de um modelo	16
2.3 Comunicação entre modelos “pai” e “filho”	16
3 MÓDULO BATIMETRIA	17
3.1 Introdução	17
4 MÓDULO GEOMETRIA	19
4.1 Introdução	19
4.2 Volumes Finitos	20
4.3 Coordenadas Verticais	21
5 MÓDULO HIDRODINÂMICO	23
5.1 Introdução	23
5.2 Equações	24
5.3 Discretização	26
5.3.1 Discretização espacial: Método dos Volumes Finitos	26
5.3.2 Discretização temporal: o Algoritmo semi-implícito ADI	26
5.3.3 Discretização de diferentes processos	27
5.3.3.1 <i>Equação da Superfície Livre</i>	27
5.3.3.2 <i>Equação da velocidade</i>	28
5.3.3.2.1 <i>Termo de Coriolis</i>	29
5.3.3.2.2 <i>Termos advectivos</i>	29

5.3.3.2.3	<i>Gradiente barotrópico de pressão</i>	30
5.3.3.2.4	<i>Gradiente baroclínico de pressão</i>	31
5.3.3.2.5	<i>Fluxos difusivos horizontais</i>	31
5.3.3.2.6	<i>Difusão vertical</i>	32
5.4	Condições de contorno	32
5.4.1	Superfície livre	32
5.4.2	Condição de contorno no fundo	33
5.4.3	Condições de contorno laterais fechadas	34
5.4.4	Fronteiras abertas	35
5.4.5	Fronteiras móveis	35
6	MÓDULO LAGRANGIANO	37
6.1	Introdução	37
6.2	Conceito de traçador	38
6.3	Equações	39
6.3.1	Deslocamento de traçadores	39
6.3.2	Difusão turbulenta	40
6.3.3	Taxa de decaimento de massa	41
6.3.4	Caixas de monitoramento	42
7	MÓDULO PETRÓLEO	45
7.1	Introdução	45
7.2	Implementação	45
7.3	Equações	47
7.3.1	Espalhamento	47
7.3.2	Densidade	50
7.3.3	Viscosidade	50
7.3.4	Evaporação	51
7.3.5	Emulsificação	53
7.3.6	Dispersão	54
7.3.7	Sedimentação	56
7.3.8	Dissolução	57
7.3.9	Aporte de petróleo em praias	58
7.3.10	Técnicas de remoção	58
7.3.10.1	<i>Dispersão química</i>	58
7.3.10.2	<i>Remoção mecânica</i>	59
8	MÓDULO PROPRIEDADES DA ÁGUA	61
8.1	Introdução	61

8.2 Equações	62
8.2.1 Transporte	62
8.2.2 Densidade	63
9 MÓDULO QUALIDADE DA ÁGUA	65
9.1 Introdução	65
9.2 Modelo geral	66
9.3 Fitoplâncton	70
9.3.1 Limitação por nutrientes	70
9.3.2 Temperatura limitante	71
9.3.3 Luz limitante	72
9.3.3.1 <i>Extinção da luz na água</i>	73
9.3.3.2 <i>Reação do fitoplâncton à incidência de luz</i>	77
9.3.4 Equações	78
9.4 Zooplâncton	80
9.4.1 Equações	81
9.5 Nitrogênio	82
9.5.1 Amônia	82
9.5.2 Nitrito	84
9.5.3 Nitrato	85
9.5.4 Nitrogênio orgânico particulado (PON, em inglês)	86
9.5.5 Nitrogênio orgânico dissolvido não refratário (DON _{nr} , em inglês)	87
9.5.6 Nitrogênio orgânico dissolvido refratário (DON _{re} , em inglês)	88
9.6 Fósforo	89
9.6.1 Fósforo inorgânico	90
9.6.2 Fósforo orgânico particulado (POP, em inglês)	90
9.6.3 Fósforo orgânico dissolvido não refratário (DOP _{nr} , em inglês)	91
9.6.4 Fósforo orgânico dissolvido refratário (DOP _{re} , em inglês)	91
9.7 Oxigênio	91
10 MÓDULO SUPERFÍCIE	93
10.1 Introdução	93
10.2 Vento	94
10.3 Fluxos de calor	94
10.3.1 Radiação solar	94
10.3.1.1 <i>Vetor radial, r</i>	95
10.3.1.2 <i>Altura solar</i>	95
10.3.1.3 <i>Radiação direta</i>	97

10.3.1.4 Radiação difusa	97
10.3.2 Fluxo de radiação infravermelha	98
10.3.3 Fluxo de calor latente	98
10.3.4 Fluxo de calor sensível	99
10.4 Fluxo de gás	99
11 MÓDULO SEDIMENTO DE FUNDO	101
11.1 Introdução	101
11.2 Erosão e deposição	101
11.2.1 Fluxo erosivo	102
11.2.2 Fluxo deposicional	103
11.3 Tensão gerada por ondas	104
11.3.1 Parâmetros de onda	105
11.3.2 Rugosidade de fundo	106
11.4 Consolidação	109
11.5 Outras notas	110
11.6 Fluxo de propriedades dissolvidas	110
12 MÓDULO MOVIMENTO VERTICAL LIVRE	113
12.1 Introdução	113
12.2 Metodologia	113
13 MÓDULO ARQUIVO HIDRODINÂMICO	115
13.1 Introdução	115
13.2 Metodologia	117
13.2.1 Integração da batimetria	117
13.2.2 Integração dos fluxos de água	119
14 REFERÊNCIAS	121
14.1 Visão Geral	121
14.2 Módulo Geometria	123
14.3 Módulo Hidrodinâmico	124
14.4 Módulo Lagrangiano	125
14.5 Módulo Petróleo	125
14.6 Módulo Propriedades da Água	127
14.7 Módulo Qualidade da Água	127
14.8 Módulo Superfície	129
14.9 Módulo Sedimento de Fundo	129

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1: Fluxo de informação entre submodelos	15
Figura 3-1: Fluxo de informação entre o Módulo Batimetria e outros módulos	17
Figura 4-1: Fluxo de informação entre o módulo geometria e outros módulos	19
Figura 4-2: Elemento de volume finito adotado no MOHID	21
Figura 4-3: Domínio Sigma com 4 camadas	22
Figura 4-4: Domínio Cartesiano com 4 camadas (shaved cells)	22
Figura 4-5: Subdivisão da coluna d'água em um domínio Cartesiano (inferior) e em um Sigma (superior)	22
Figura 5-1: Fluxo de informação entre o Módulo Hidrodinâmico e outros módulos	23
Figura 6-1: Fluxo de informação entre o Módulo Lagrangiano e outros módulos	38
Figura 6-2: Movimento randômico forçado por vórtices de dimensões maiores que a partícula	40
Figura 6-3: Movimento randômico forçado por vórtices de dimensões menores que a partícula	41
Figura 7-1 Fluxo de informação entre o Módulo Petróleo e outros módulos	46
Figura 8-1: Fluxo de informação presente entre o Módulo Propriedades da Água e outros módulos	62
Figura 9-1: Fluxo de informação entre o Módulo Qualidade da Água e outros módulos	68
Figura 9-2: Fluxo interno de fitoplâncton	78
Figura 9-3: Fluxo interno de zooplâncton	81

Figura 9-4: Fluxo interno de amônia	83
Figure 9-5: Fluxo interno de nitrito	85
Figure 9-6: Fluxo interno de nitrato	86
Figure 9-7: Fluxo interno de PON	87
Figura 9-8: Fluxo interno de DONnr modelado no MOHID	88
Figura 9-9: Fluxo interno de DONre modelado no MOHID	89
Figura 9-10: Fluxo interno de fósforo inorgânico	90
Figura 9-11: Fluxo interno de oxigênio inorgânico	91
Figura 10-1: Fluxo de informação entre o Módulo Superfície e outros módulos	93
Figura 13-1: Representação esquemática da integração espacial	116
Figura 13-2: Fluxo de informação entre o Módulo Arquivo Hidrodinâmico e outros módulos	117
Figura 13-3: Integração da batimetria pelo método da "Integração Média"	118
Figura 13-4: Integração da batimetria pelo método da "Integração Máxima"	118
Figura 13-5: Representação esquemática da integração dos fluxos de água	119

LISTA DE TABELAS

Tabela 1-1: Principais módulos do modelo Mohid	11
--	----

1

VISÃO GERAL

1.1 Introdução

Esse documento descreve o sistema MOHID de modelagem tridimensional de um corpo d'água. O sistema MOHID inclui o Módulo Hidrodinâmico baroclínico para a coluna e uma versão 3D para os sedimentos e os correspondentes módulos de transporte, tanto eulerianos quanto lagrangianos. Parâmetros e processos envolvendo constituintes não conservativos são objeto de módulos específicos (ex.: módulo turbulência, qualidade da água, ecologia e transformação de petróleo). O módulo turbulência faz uso do conhecido modelo GOTM¹ para turbulência.

Os modelos que compreendem o MOHID foram desenvolvidos por uma grande equipe de técnicos colaboradores do centro de investigação MARETEC (www.maretec.ist.utl.pt) pertencentes ao Instituto Superior Técnico², a Escola de Engenharia da Universidade Técnica de Lisboa, em cooperação próxima com a empresa Hidromod Ltda³ desde os meados dos anos 80, e incluem contribuições de uma equipe permanente de pesquisadores, de alunos de doutorado dos Programas de Engenharia Ambiental e Mecânica, bem como de alunos do Curso de Mestrado em Modelagem de Ambientes Marinhos. Contribuições de outros grupos de pesquisa que incluem escolas e empresas de vários países têm igualmente sido relevantes para o desenvolvimento do MOHID.

A arquitetura do MOHID é atualmente coordenada por Ramiro Neves, Frank Braunschweig e Paulo Leitão⁴. A engenharia do MOHID tem como

¹ GOTM (General Ocean Turbulence Model) – (<http://www.gotm.net/>).

² Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal. (<http://ist.utl.pt>).

³ Sala 349, Núcleo Central do Tagus Park, 2780-982, Porto Salvo, Portugal (<http://www.hidromod.pt>).

⁴ Ricardo Miranda, um membro antigo deste grupo também deu uma importante contribuição para a arquitetura e engenharia do modelo.

principais responsáveis: Paulo Leitão, Frank Braunschweig, Pedro Pina, Luis Fernandes, Rodrigo Fernandes, Pedro Chambel Leitão, Manuel Villarreal e Pedro Montero. Os principais colaboradores no que diz respeito aos conceitos presentes no modelo e na validação e operacionalidade do mesmo são Ramiro Neves, Adélio Silva, José Leitão, Flávio Martins e Aires dos Santos. Uma grande quantidade de outros colaboradores foi responsável por forte influência no desenvolvimento do MOHID.

1.2 Histórico

O desenvolvimento do MOHID iniciou-se em 1985, sendo desde então submetido a um contínuo melhoramento e atualização, devido à sua aplicação em muitas pesquisas e projetos de engenharia. Inicialmente o MOHID consistia em um modelo bidimensional forçado pela maré (NEVES, 1985). Esse modelo era utilizado no estudo de estuários e zonas costeiras, sendo resolvido através do clássico método de Diferenças Finitas. Nos anos subsequentes, os módulos de transporte euleriano e lagrangiano foram incluídos no modelo, bem como um modelo não hidrostático de Boussinesq para ondas de gravidade (SILVA, 1992). O primeiro modelo tridimensional foi introduzido por Santos (1995), o qual utilizava coordenadas Sigma dupla (MOHID 3D). As limitações das coordenadas Sigma dupla revelaram a necessidade de se desenvolver um modelo que fosse capaz de utilizar um sistema genérico de coordenadas verticais, permitindo ao usuário selecioná-las, dependendo dos processos abordados na área de estudo. Diante dessa necessidade, foi introduzido o conceito de volumes finitos, com a versão *Mesh 3D*, por Martins (1999). Nessa nova versão do MOHID foram incluídos modelos 3D com abordagens euleriana e lagrangiana (LEITÃO, 1996), bem como um modelo adimensional de qualidade da água (MIRANDA, 1999). Essa versão mostrou que a utilização de um modelo integrado, baseado em um sistema genérico de coordenadas, torna-se uma poderosa ferramenta. Entretanto, foram verificadas limitações para a sua manutenção e desenvolvimento, oriundas da linguagem FORTRAN 77 de programação. Dessa forma, decidiu-se por reorganizar o modelo fazendo-se uso da FORTRAN 95 conjugada com uma estratégia objeto-orientada.

1.3 Estágio Atual

Com a crescente complexidade, tornou-se necessário introduzir uma

nova forma de organização da informação do modelo MOHID. Em 1998, o seu código como um todo foi submetido a uma completa reformulação, fazendo-se uso de novas técnicas de linguagem de programação, bem como da crescente capacidade computacional para reprogramar todo o modelo. O objetivo principal dessa reformulação foi tornar o modelo mais robusto e confiável, além de protegê-lo de eventuais erros de programação, garantindo-se, dessa forma, que futuros desenvolvimentos fossem obtidos de forma sustentável. Para atingir esse objetivo, a programação orientada a objeto em FORTRAN foi introduzida no MOHID, como descrito por Decyk et al. (1997).

A filosofia do novo modelo MOHID (MIRANDA et al., 2000), doravante designado apenas como MOHID, permite a utilização do modelo em suas abordagens uni, bi e tridimensional. Todo o modelo está programado em ANSI FORTRAN 95, fazendo uso da filosofia objeto-orientada. A subdivisão do programa em módulos, assim como o fluxo de informações entre esses módulos, foi objeto de estudo por parte dos autores do MOHID. Atualmente, o MOHID é composto por mais de 40 módulos, os quais somam mais de 150.000 linhas de programação. Cada módulo é responsável por gerenciar um certo tipo de informação. Os principais módulos são listados na Tabela 1-1.

Outra importante característica do MOHID é a possibilidade de rodar submodelos. Essa característica permite ao usuário estudar áreas restritas da região abordada, obtendo as condições de contorno do modelo “pai”. O número de submodelos implementados depende unicamente da capacidade do computador utilizado.

Tabela 1-1: Principais módulos do modelo MOHID

Módulo	Descrição
Model	Gerencia o fluxo de informações entre o módulo hidrodinâmico e os dois módulos de transporte, bem como a comunicação entre os submodelos.
Hydrodynamic	Modelo tridimensional baroclínico com superfície livre. Calcula o nível, as velocidades e os fluxos de água.
Water Properties (Eulerian Transport)	Modelo de transporte com abordagem euleriana, sendo capaz de simular a evolução de propriedades da água, como temperatura, salinidade, oxigênio etc.

Lagrangian	Capaz de simular a evolução das mesmas propriedades, utilizando a abordagem lagrangiana. Também pode ser utilizado para simular a dispersão de petróleo.
Water Quality	Modelo adimensional de qualidade de água. Simula o ciclo do oxigênio, de espécies de nitrogênio e do fósforo. Está acoplado aos modelos de transporte, tanto na abordagem euleriana quanto na lagrangiana. Baseado em modelo inicialmente desenvolvido pela EPA (BOWIE et al., 1985).
Oil Dispersion	Módulo de dispersão de petróleo. Simula o espalhamento de petróleo devido a gradientes de concentração e reações internas, como evaporação, emulsificação, dispersão, dissolução e sedimentação.
Turbulence	Modelo unidimensional de turbulência. Faz uso da formulação adotada no modelo GOTM.
Geometry	Armazena e atualiza as informações de volumes finitos
Surface	Condição de contorno no topo da coluna d'água
Bottom	Condição de contorno no limite inferior da coluna d'água
Open Boundary	Condição de contorno na fronteira marinha
Discharges	Descargas em rios ou descargas antropogênicas
Hydrodynamic File	Módulo auxiliar utilizado para armazenar a solução do modelo hidrodinâmico em um arquivo externo, para posterior utilização.

1.4 Aplicações

O MOHID tem sido aplicado em diversas regiões costeiras e estuarinas, se mostrando capaz de simular complexas características presentes em escoamentos observados nessas regiões. O modelo tem sido aplicado tanto como ferramenta de pesquisa, quanto em projetos de consultoria. Ao longo da costa portuguesa, diferentes ambientes têm sido estudados com o seu auxílio, incluindo os seus principais estuários (Minho, Lima, Douro, Mondego, Tejo, Sado, Mira, Arade e Guadiana) e lagoas costeiras (Ria de Aveiro e Ria Formosa) (INAG, 2001; MARTINS et al., 2000). O modelo foi igualmente implementado na maioria das lagoas da Galícia como Ría de Vigo (TABOADA et al., 1998; MONTERO, 1999 e MONTERO et al., 1999), Ría de Pontevedra (TABOADA et al., 2000; VILLARREAL et al., 2000), além de outras lagoas (PÉREZ VILLAR et al., 1999).

Além das regiões costeiras da Península Ibérica, alguns estuários têm sido modelados, como o Western Scheldt (Holanda), Gironde (França), esses através de modelos desenvolvidos por Cancino e Neves (1999) e o estuário de Carlingford, Irlanda, através de modelo desenvolvido por Leitão (1997), assim como alguns estuários localizados na costa brasileira, como nas cidades de Santos e Fortaleza.

Com relação à modelagem de mar aberto, o modelo MOHID já foi aplicado na região do Atlântico Nordeste, onde alguns processos foram estudados, incluindo a corrente costeira de Portugal (COELHO et al.,1994), o comportamento de correntes ao longo do limite da Plataforma Continental no Atlântico Europeu (NEVES et al.,1998) e a geração interna de ondas de maré (NEVES et al.,1998). Além disso, o modelo também foi aplicado no Mar Mediterrâneo, com o objetivo de se simular ciclos sazonais (TABOADA, 1999), e nos estudo da circulação do mar de Alborão (SANTOS, 1995). Mais recentemente o MOHID foi aplicado em diversos reservatórios de água doce portugueses, como Monte Novo, Roxo e Alqueva (BRAUNSCHWEIG, 2001), com o objetivo de estudar o escoamento e a qualidade da água desses sistemas.

O sistema MOHID está estruturado em módulos, que são apresentados tal como se segue.

2

MÓDULO MODELO

2.1 Introdução

O módulo modelo representa, hierarquicamente falando, o mais alto nível dentro do MOHID, tendo duas principais atribuições, a coordenação da execução dos módulos hidrodinâmico e de transporte, bem como a coordenação da comunicação pai-filho entre submodelos. A Figura 2-1 mostra essa coordenação.

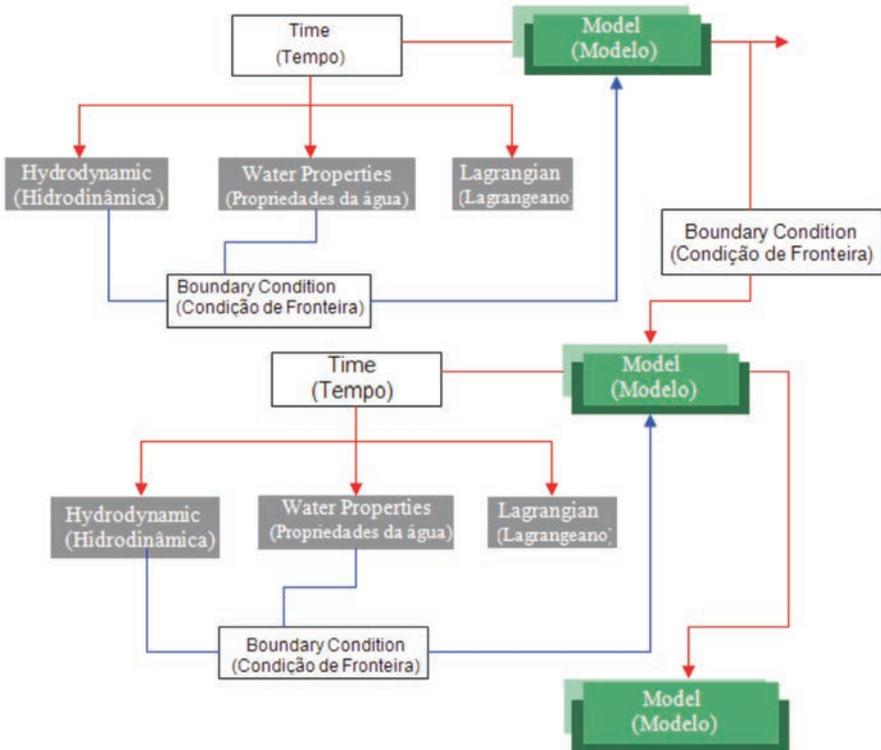


Figura 2-1: Fluxo de informação entre submodelos

2.2 Execução de um modelo

A coordenação de execução de um modelo consiste na atualização dos módulos hidrodinâmicos e de transporte dentro de um dado modelo. O módulo transporte pode rodar com passos de tempo distintos dos adotados no módulo hidrodinâmico, uma vez que os passos de tempo do primeiro são múltiplos dos passos de tempo do segundo.

2.3 Comunicação entre modelos “pai” e “filho”

A coordenação do fluxo de informação entre submodelos inclui a sincronização entre esses diferentes modelos, uma vez que cada um deles pode rodar com passos de tempo diferentes. A coordenação de submodelos é realizada de forma hierarquizada. Todo modelo pode ter um ou mais modelos-filho, os quais, por sua vez e recursivamente podem ter um ou mais modelos-filho. Toda a comunicação é feita em um único sentido, a partir das condições de fronteira fornecidas pelo modelo-pai aos modelos-filho.

3

MÓDULO BATIMETRIA

3.1 Introdução

O módulo batimetria, hierarquicamente falando, está em um dos mais baixos níveis dentro do sistema MOHID. Ele basicamente lê os dados de um arquivo ASCII e os disponibiliza para os módulos que utilizam esses dados.

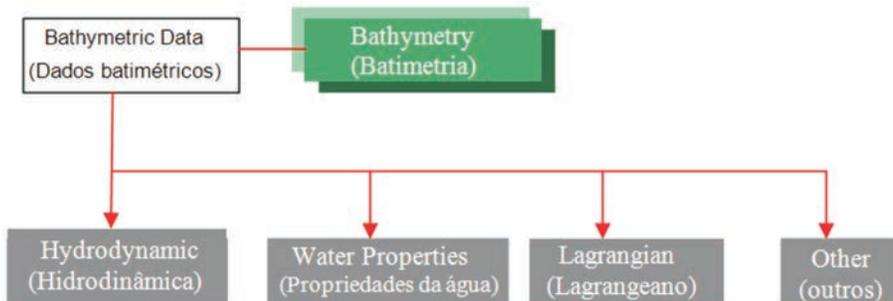


Figura 3-1: Fluxo de informação entre o Módulo Batimetria e outros módulos

Os dados batimétricos podem ser armazenados em qualquer *grid* regular, com diferentes espaçamentos nas direções X e Y. Cada ponto do *grid* deve ter suas coordenadas estabelecidas, com a possibilidade de as coordenadas horizontais informadas ao modelo serem de diversos tipos, sendo as geográficas e métricas as mais usuais.

4

MÓDULO GEOMETRIA

4.1 Introdução

O módulo geometria computa as áreas laterais e volumes dos volumes finitos que são gerados no método de discretização adotado, fazendo uso da elevação da superfície livre e dos dados batimétricos que são informados ao modelo. Essa informação é sempre atualizada, sendo disponibilizada para outros módulos do MOHID. A Figura 4-1 representa o fluxo de informação entre o módulo geometria e outros módulos.

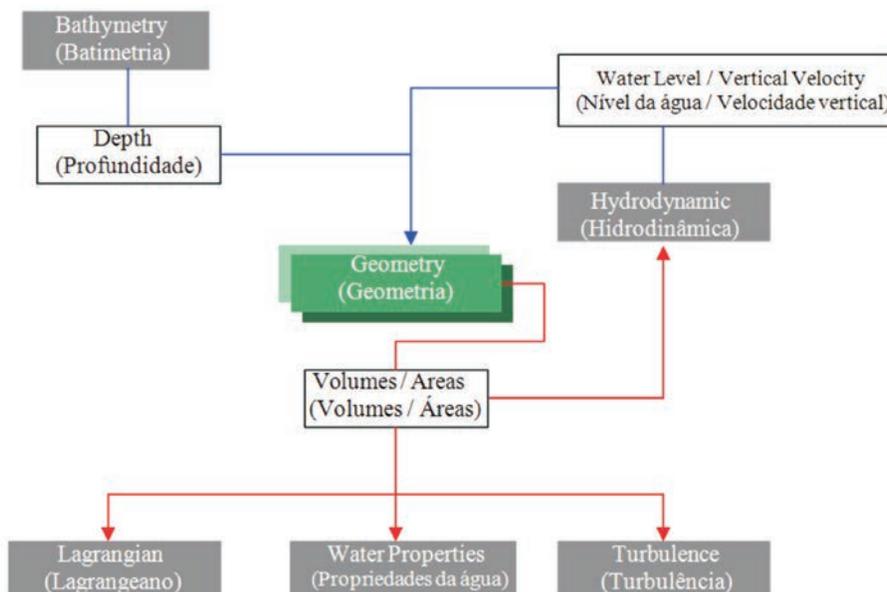


Figura 4-1: Fluxo de informação entre o módulo geometria e outros módulos

4.2 Volumes Finitos

O MOHID faz uso do Método dos Volumes Finitos (CHIPPADA et al., 1998; MARTINS et al., 1999, 2000) na discretização das equações. Nesse método, a forma discreta das equações é aplicada macroscopicamente em um volume de controle. A Lei de Conservação para um dado escalar U , considerando-se fontes Q em um volume de controle Ω , é então descrita como:

$$\partial_t \int_{\Omega} U d\Omega + \oint_S \vec{F} d\vec{S} = \int_{\Omega} Q d\Omega \quad \text{Eq. 4-1}$$

onde F representa os fluxos do escalar através da superfície S do volume de controle. Após discretizada, essa expressão para um dado volume de controle Ω_j , onde U_j é definida, obtém-se:

$$\partial_t (U_j \Omega_j) + \sum_{\text{faces}} \vec{F} \cdot \vec{S} = Q_j \Omega_j \quad \text{Eq. 4-2}$$

Dessa forma, o procedimento para a resolução das equações independe da geometria de cada célula. Na realidade, cada célula pode ter qualquer forma, tendo apenas poucas restrições (veja MONTERO, 1999 ou MARTINS, 2000), uma vez que somente é necessário conhecer o fluxo entre células. Assim, consegue-se uma completa separação entre as variáveis físicas e a geometria (HIRSCH, 1988). Como os volumes podem variar no curso dos cálculos, a geometria é atualizada a cada passo de tempo em que as variáveis físicas são computadas. Além disso, as coordenadas espaciais são igualmente independentes, e qualquer geometria pode ser escolhida para cada uma das dimensões. Coordenadas cartesianas e curvilíneas podem ser utilizadas no plano horizontal, enquanto que uma coordenada vertical genérica com diferentes subdomínios pode ser utilizada no plano vertical. Essa coordenada vertical permite a minimização de erros que estão presentes em muitas coordenadas verticais clássicas (Cartesiana, Sigma, Isopicnal), conforme mostrado por Martins et al. (2000).

O elemento de volume utilizado no MOHID é mostrado na Figura 4-2.

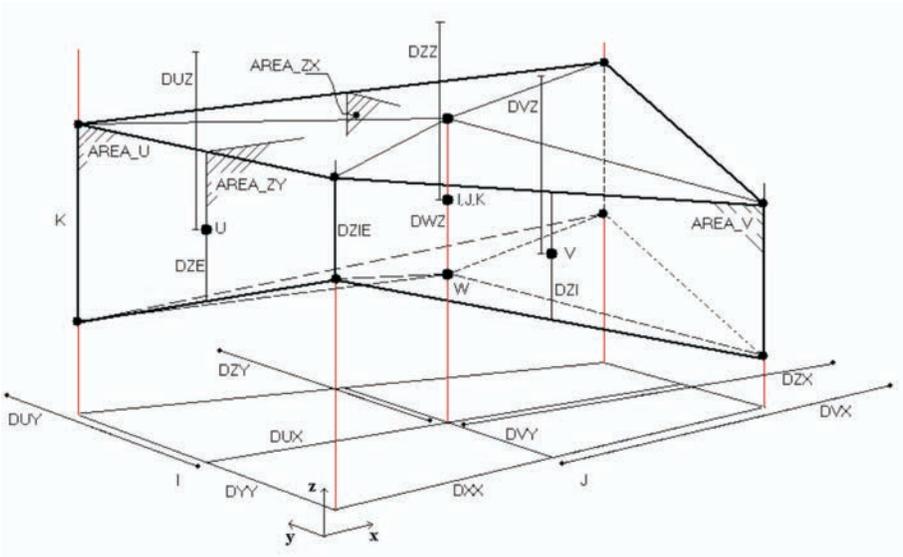


Figura 4-2: Elemento de volume finito adotado no MOHID

Apenas um grau de liberdade é permitido e a *grid* é ortogonal Cartesiano no plano horizontal, sendo deslocado (ARAKAWA e LAMB, 1977), de modo que as velocidades horizontais são resolvidas no centro das faces oeste (componente u da velocidade) e sul (componente v da velocidade), enquanto que a elevação da superfície livre, parâmetros de turbulência e concentração de traçadores são resolvidos no centro do volume. Ele também é deslocado na direção vertical, com a componente w da velocidade, concentração de traçadores e parâmetros de turbulência posicionados nas faces de fundo e topo, enquanto as componentes horizontais de velocidade e elevação da superfície livre posicionam-se no centro do volume, pela perspectiva vertical.

4.3 Coordenadas Verticais

Atualmente, o módulo Geometria pode subdividir a coluna d'água em diferentes coordenadas: Sigma, Cartesiana, Lagrangiana (baseada na coordenada Sigma ou na Cartesiana), "Espaçamento Fixo" e Harmônica. Uma subdivisão da coluna d'água em diferentes domínios também é

possível. As coordenadas Sigma e Cartesiana representam os sistemas clássicos, sendo que essa última pode ser utilizada com ou sem células cortadas. A coordenada Lagrangiana movimentada as faces superiores e inferiores do volume de controle obedecendo a velocidade de escoamento. Já a coordenada de “Espaçamento Fixo” permite ao usuário estudar o escoamento próximo ao fundo e a Harmônica funciona como a coordenada Cartesiana, com a diferença de que as faces do volume de controle se expandem ou colapsam dependendo da variação da superfície livre. Essa coordenada foi implementada no Módulo Geometria para a simulação de reservatórios.

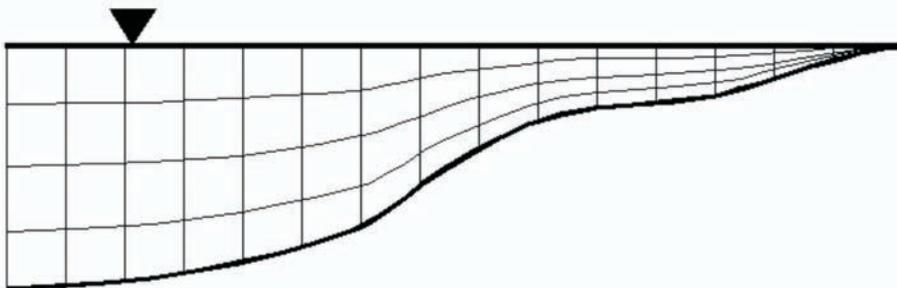


Figura 4-3: Domínio Sigma com 4 camadas

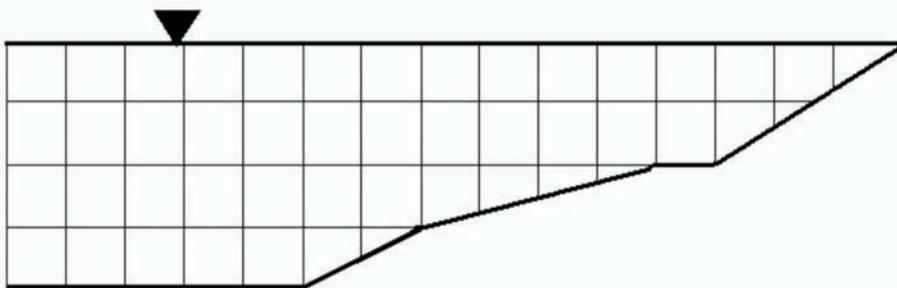


Figura 4-4: Domínio Cartesiano com 4 camadas (shaved cells)

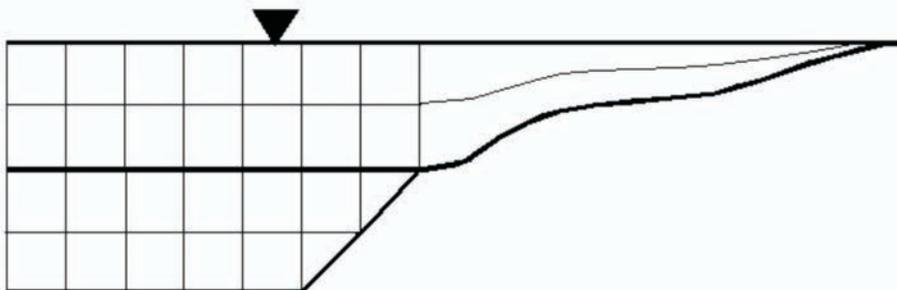


Figura 4-5: Subdivisão da coluna d'água em um domínio Cartesiano (inferior) e em um Sigma (superior)

5

MÓDULO HIDRODINÂMICO

5.1 Introdução

O Módulo Hidrodinâmico do MOHID é descrito nesta seção. O fluxo de informação desse módulo em relação aos demais módulos é apresentado na Figura 5-1.

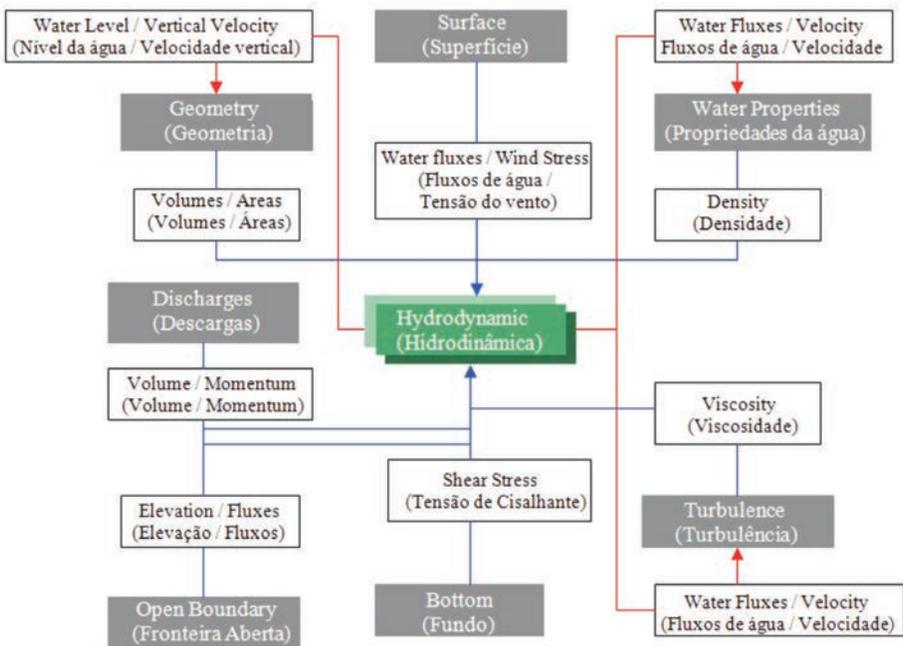


Figura 5-1: Fluxo de informação entre o Módulo Hidrodinâmico e outros módulos

5.2 Equações

O MOHID resolve as equações primitivas que formulam o escoamento tridimensional incompressível. Tanto o equilíbrio hidrostático quanto as aproximações de Boussinesq e Reynolds são considerados. As Equações de *momentum* para as velocidades médias horizontais, na forma Cartesiana, são dadas por:

$$\begin{aligned} \partial_t u = & -\partial_x(uu) - \partial_y(uv) - \partial_z(uw) + fv - \frac{1}{\rho_0} \partial_x p \\ & + \partial_x((v_H + \nu) \partial_x u) + \partial_y((v_H + \nu) \partial_y u) + \partial_z((v_t + \nu) \partial_z u) \end{aligned} \quad \text{Eq. 5-1}$$

$$\begin{aligned} \partial_t v = & -\partial_x(vu) - \partial_y(vv) - \partial_z(vw) - fu - \frac{1}{\rho_0} \partial_y p \\ & + \partial_x((v_H + \nu) \partial_x v) + \partial_y((v_H + \nu) \partial_y v) + \partial_z((v_t + \nu) \partial_z v) \end{aligned} \quad \text{Eq. 5-2}$$

Onde u , v e w são as componentes do vetor velocidade nas direções x , y e z , respectivamente, f o parâmetro de Coriolis, ν_H e ν_t a viscosidade turbulenta nos sentidos horizontal e vertical, ν é a viscosidade cinemática molecular (igual a $1,3 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$), p é a pressão. A evolução temporal das velocidades (termo do lado esquerdo) é igual ao balanço de transporte advectivo (três primeiros termos do lado direito), força de Coriolis (quarto termo), o gradiente de pressão (próximos três termos) e difusão turbulenta (últimos três termos).

A velocidade vertical é calculada a partir da equação de continuidade incompressível (equação de balanço de massa):

$$\partial_x u + \partial_y v + \partial_z w = 0 \quad \text{Eq. 5-3}$$

através da integração entre o fundo e a profundidade z , onde w é calculado:

$$w(z) = \partial_x \int_{-h}^z u dx + \partial_y \int_{-h}^z v dy \quad \text{Eq. 5-4}$$

A equação da superfície livre é obtida pela integração da equação de continuidade ao longo de toda a coluna d'água (entre a elevação da superfície livre $\eta(x, y)$ e no fundo $-h$):

$$\partial_t \eta = -\partial_x \int_{-h}^{\eta} u dz - \partial_y \int_{-h}^{\eta} v dz \quad \text{Eq. 5-5}$$

A aproximação hidrostática é assumida com:

$$\partial_z p + g\rho = 0 \quad \text{Eq. 5-6}$$

onde g é a gravidade e ρ é a densidade. Se a pressão atmosférica (P_{atm}) é subtraída de p , e a densidade ρ é dividida por uma referência constante densidade ρ_0 e um desvio ρ' proveniente da referência constante da densidade, após integração a partir da superfície livre para a profundidade z , onde a pressão é calculada, chegamos a:

$$p(z) = P_{atm} + g\rho_0(\eta - z) + g \int_z \eta \rho' dz \quad \text{Eq. 5-7}$$

A Eq. 5-7 relaciona pressão a qualquer profundidade, a pressão atmosférica no superfície do mar, o nível do mar e a pressão anômala integrada entre esse nível e o da superfície. Ao utilizar esta expressão e a aproximação de Boussinesq, o gradiente de pressão horizontal na direção x_i pode ser dividido em três contribuições:

$$\partial_{x_i} p = \partial_{x_i} p_{atm} - g\rho_0 \partial_{x_i} \eta - g \int_z \eta \partial_{x_i} \rho' dz \quad \text{Eq. 5-8}$$

O gradiente de pressão total é a soma dos gradientes de pressão atmosférica, de elevação da superfície do mar (gradiente de pressão barotrópico) e da distribuição da densidade (gradiente de pressão baroclínico). Essa decomposição do gradiente de pressão é substituída nas equações 5-1 e 5-2.

A densidade é obtida a partir da salinidade e da temperatura, que são “transportadas” pelo módulo “propriedades da água”.

5.3 Discretização

5.3.1 Discretização espacial: Método dos Volumes Finitos

A discretização espacial foi discutida no item Módulo Geometria.

5.3.2 Discretização temporal: o Algoritmo semi-implícito ADI

A discretização temporal é implementada através do algoritmo semi-implícito ADI (Alternate Direction Implicit), introduzido por Peaceman e Racford em 1955 (FLETCHER, 1991). Esse algoritmo computa, de forma alternada, uma componente horizontal de velocidade na forma implícita, e a outra na forma explícita. Resulta desse procedimento um sistema de equações tridiagonal que pode ser resolvido pelo algoritmo de Thomas, de forma rápida e eficiente. Isso permite preservar as vantagens da estabilidade, garantidas pelos métodos implícitos, sem a desvantagem de elevados custos computacionais e erros associados. Dessa forma, passos de tempo relativamente grandes podem ser adotados. Duas diferentes discretizações são codificadas no modelo: uma que envolve 4 equações com dois distintos passos de tempo por iteração, o esquema S21 (Equação 5-9) de Abbott et al. (1973); e outra, que envolve 6 equações, obtida pelo algoritmo de Leenderstsee (1967), mais conveniente quando zonas intertidais têm que ser modeladas, uma vez que nessa situação as velocidades têm que ser atualizadas a cada

meio passo de tempo. O esquema S21 é mostrado na Equação 5-9.

$$\begin{aligned}
 &\eta^{t+1/2}(u^{t+1}, u^t, v^{t+1/2}, v^{t-1/2}) \rightarrow u^{t+1} \rightarrow \\
 &w^{*t+1/2} \xrightarrow{\text{GeometryUpdate}} w^{t+1/2} \rightarrow S^{t+1/2}, T^{t+1/2} \rightarrow \\
 &\eta^{t+1}(u^t, u^{t+1}, v^{t+3/2}, v^{t+1/2}) \rightarrow u^{t+3/2} \rightarrow \\
 &w^{*t+1} \xrightarrow{\text{GeometryUpdate}} w^{t+1} \rightarrow S^{T+1}, T^{T+1}
 \end{aligned}
 \tag{Eq. 5-9}$$

Cada iteração é dividida em 2 metades de passo. No primeiro meio passo, a elevação da superfície livre η e uma das componentes horizontais de velocidade, u por exemplo, são computadas de forma implícita. O valor requerido para a outra componente é tomado do passo de tempo anterior. Uma velocidade vertical (provisória) w^* é computada pela Equação da Continuidade. A geometria é, então, atualizada e a velocidade vertical w corrigida. O mesmo procedimento é adotado no próximo meio passo de tempo, mas para a outra componente horizontal de velocidade. Nesse diagrama, salinidade e temperatura são computadas a cada meio passo de tempo. Como os modos internos são muito mais lentos do que os externos, S e T podem ser atualizadas em passos de tempo maiores, sem perda de acurácia e estabilidade.

5.3.3 Discretização de diferentes processos

Uma breve descrição dos diferentes processos simulados no MOHID será dada no que segue. A descrição completa pode ser obtida em Martins (2000) e Montero (1999).

5.3.3.1 Equação da Superfície Livre

A elevação da superfície livre é obtida através da integração da Equação da Continuidade realizada em toda a coluna d'água. Na abordagem utilizada no Método de Volumes Finitos, essa integração é feita através

da soma dos fluxos que atravessam todos os volumes discretos que compõem a coluna d'água. Para o esquema S21, em um meio passo de tempo, tem-se:

$$\frac{\eta_{ij}^{t+1/2} - \eta_{ij}^t}{\Delta t / 2} = \frac{1}{A_{hij}} \left[\frac{1}{2} \left(\sum_{kbot}^{kmax} U_{ijk}^{t+1} A_{ijk}^t + \sum_{kbot}^{kmax} U_{ijk}^t A_{ijk}^t \right) - \frac{1}{2} \left(\sum_{kbot}^{kmax} U_{ij+1k}^{t+1} A_{ij+1k}^t + \sum_{kbot}^{kmax} U_{ij+1k}^t A_{ij+1k}^t \right) \right]$$

+

$$\frac{1}{A_{hij}} \left[\frac{1}{2} \left(\sum_{kbot}^{kmax} V_{ijk}^{t+1/2} A_{ijk}^t + \sum_{kbot}^{kmax} U_{ijk}^{t-1/2} A_{ijk}^t \right) - \frac{1}{2} \left(\sum_{kbot}^{kmax} V_{i+1jk}^{t+1/2} A_{i+1jk}^t + \sum_{kbot}^{kmax} U_{i+1jk}^{t-1/2} A_{i+1jk}^t \right) \right] \quad \text{Eq. 5-10}$$

Onde $A_{hij} = DUX_{ij} * DVY_{ij}$ é a área projetada no plano horizontal. Os fluxos são promediados no tempo, de modo que o cálculo é feito para t+1/2. Uma discretização análoga é conduzida para o próximo meio passo de tempo. Os fluxos $U \cdot AU$ e $V \cdot AV$ são obtidos da equação de *momentum*. A discretização dos diferentes termos envolvidos será discutida a seguir.

5.3.3.2 Equação da velocidade

Se a Equação 5-1 é discretizada fazendo-se uso do esquema S21, chega-se a (uma equação equivalente pode ser obtida para a componente v) para cada célula u_{ijk} do *grid*:

$$\frac{\Omega_{u_{ijk}}^t (U_{ijk}^{t+1} - U_{ijk}^t)}{\Delta t} + \sum_{m=1}^{Nfaces} \vec{F}_m \cdot \vec{n}_m A_m = f_{u_{ijk}} \Omega_{u_{ijk}}^t \bar{V}_{ijk}^t \quad \text{Eq. 5-11}$$

onde Ω_t é o volume da célula onde será computada U_{ij} , e f_{uijk} é o valor do parâmetro de Coriolis para essa célula. O valor de \bar{V}_{ijk}^t representa o valor promediado no tempo da componente v da velocidade nessa mesma célula. O segundo termo no lado esquerdo da equação representa o fluxo de forças F_m que atravessa a superfície A_m da célula m . A força de Coriolis é o termo no lado direito da equação, sendo que os demais termos estão incluídos na soma apresentada no lado esquerdo dessa equação.

5.3.3.2.1 Termo de Coriolis

Como pode ser visto no lado direito da Equação 5-11, o termo de Coriolis é discretizado explicitamente, ainda que isso represente uma restrição em relação à dimensão do passo de tempo Δt ($\Delta t \leq 2/f$, onde f é o parâmetro de Coriolis). Essa limitação não é crítica para aplicações em regiões costeiras. Por exemplo, para latitudes de 43° , implica $\Delta t \leq 2000 \text{ s} \approx 5 \text{ h } 30 \text{ min}$, ou seja, intervalo de tempo muito maior do que o passo de tempo normalmente utilizado naquelas aplicações. Os outros termos adotados nessa formulação são expressos como fluxos através das superfícies dos volumes de controle, e fazem parte, dessa forma, do segundo termo do lado esquerdo da equação de *momentum*.

5.3.3.2.2 Termos advectivos

Com o objetivo de garantir a conservação de *momentum*, o divergente dos fluxos dentro de cada elemento de volume deve ser nulo. Isso é obtido aplicando-se no fluxo advectivo o mesmo procedimento adotado no cômputo da elevação da superfície livre e da velocidade vertical. Os fluxos advectivos em cada célula são computados por:

$$\begin{aligned}
-\sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_m \cdot \vec{n} A_m = & \left[(U \cdot ufluxU)_{ij+1k}^t - (U \cdot ufluxU)_{ijk}^t + \right. \\
& (U \cdot ufluxV)_{i+1jk}^t - (U \cdot ufluxV)_{ijk}^t + \\
& \left. (U \cdot ufluxW)_{ij+1k}^t - (U \cdot ufluxW)_{ijk}^t \right] \quad \text{Eq. 5-12}
\end{aligned}$$

com $ufluxU_i$ denotando o fluxo de U_i através da célula de cálculo de u . Um esquema misto de diferenças centradas é utilizado para computar $ufluxU_i$ (JAMES,1987; SANTOS, 1995). Os fluxos advectivos horizontais são discretizados explicitamente, uma vez que as restrições impostas por ondas superficiais na estabilidade são pequenas para a faixa característica de velocidades que normalmente se obtém nessas simulações. O termo advectivo vertical pode ocasionar problemas se a espessura da camada de água for pequena, como pode acontecer em regiões rasas ao se utilizar *grids* do tipo sigma. Duas alternativas foram introduzidas no modelo com o objetivo de contornar-se esse problema: o uso de uma discretização implícita ou simplesmente desconsiderar esse termo nessas regiões.

5.3.3.2.3 Gradiente barotrópico de pressão

A restrição imposta à estabilidade pelas ondas superficiais motivou a implementação de um algoritmo semi-implícito. Dessa forma, o termo barotrópico de gradiente de pressão limita a estabilidade, sendo, portanto, discretizado de forma implícita. Para a célula u_{ijk} e considerando-se o primeiro meio passo de tempo tem-se :

$$-\sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_m \cdot \vec{n} A_m = \frac{1}{\rho_0} \left[(P_{atm_{y-1}}^{t+1/2} - P_{atm_y}^{t+1/2}) + \rho_0 g (\eta_{ij-1}^{t+1/2} - \eta_{ij}^{t+1/2}) \right] A_{u_{ijk}}^t \quad \text{Eq. 5-13}$$

Essa expressão, quando substituída na equação da superfície livre, resulta em um sistema tridiagonal, que é resolvido por eliminação de Gauss. Nas equações de velocidade, os valores de η já são conhecidos, o que

permite uma discretização explícita desse termo quando introduzido nas equações de *momentum*.

5.3.3.2.4 Gradiente baroclínico de pressão

Modos internos não introduzem uma restrição estrita à estabilidade, de modo que o gradiente baroclínico de pressão pode ser discretizado de forma explícita. Os fluxos introduzidos por esse termo, que ocorrerem através das faces de uma da célula $u_{ijk'}$ são dados por:

$$\begin{aligned}
 - \sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_m \cdot \vec{n} S_m = \frac{g}{\rho_0} & \left(\sum_{l=k+1}^{k \max} (\rho'_{ij-1l} DWZ_{ij-1l}) + \rho'_{ij-1k} \Delta z_{ij-1k}^t \right) A_{u_{ijk}}^t \\
 & - \left(\sum_{l=k+1}^{k \max} (\rho'_{ijl} DWZ_{ijl}) + \rho'_{ijk} \Delta z_{ijk}^t \right) A_{u_{ijk}}^t
 \end{aligned} \tag{Eq. 5-14}$$

onde Δz_{ijk} representa a distância vertical entre o topo da célula de controle e o ponto onde é calculada a velocidade, que surge do deslocamento vertical do *grid* (ρ' não é definida no mesmo ponto em que é definida a componente u da velocidade).

5.3.3.2.5 Fluxos difusivos horizontais

Fluxos difusivos horizontais são computados em cada face vertical das células de controle, sendo esses fluxos normais às faces:

$$\begin{aligned}
 - \sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_m \cdot \vec{n} A_m = & (F_{ij-1/2k}^t Azx_{ij-1k}^t - F_{ij+1/2k}^t Azx_{ijk}^t) + \\
 & (F_{i-1/2jk}^t \frac{Av_{ijk}^t + Av_{ij-1k}^t}{2} - F_{i+1/2jk}^t \frac{Av_{i+1jk}^t + Av_{i+1j-1k}^t}{2})
 \end{aligned} \tag{Eq. 5-15}$$

Os fluxos na direção x são dados por:

$$F_{ij-1/2k} = v_{H_{ij-1k}}^t \frac{U_{ijk}^t - U_{ij-1k}^t}{DUX_{ij-1}} \quad \text{Eq. 5-16}$$

e na direção y são dados por :

$$F_{i-1/2jk} = v_{H_{i-1/2j-1/2k}}^t \frac{U_{ijk}^t - U_{ij-1k}^t}{(DYY_{ij} + DYY_{i-1j})/2} \quad \text{Eq. 5-17}$$

onde o coeficiente de viscosidade horizontal v_{th} é interpolado para o ponto adequado.

5.3.3.2.6 Difusão vertical

Esses termos precisam ser discretizados de forma implícita, devido à restrição imposta pelos métodos diretos no passo de tempo, considerando-se a escala de resolução que normalmente é adotada nas aplicações do MOHID.

$$-\sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_m \cdot \vec{n} A_m = (F_{ijk-1/2}^{t+1} - F_{ijk+1/2}^{t+1}) A_{h_{ij-1/2}}^t \quad \text{Eq. 5-18}$$

com fluxos dados por

$$F_{ijk-1/2}^{t+1} = v_{ij-1/2k-1}^t \frac{U_{ijk}^{t+1} - U_{ijk-1}^{t+1}}{DUZ_{ijk-1}^t} \quad \text{Eq. 5-19}$$

5.4 Condições de contorno

5.4.1 Superfície livre

Todos os fluxos advectivos através da superfície livre são desconsiderados. Essa condição é imposta, considerando-se que o fluxo de W na superfície é nulo.

$$Wflux|_{surface} = 0 \quad \text{Eq. 5-20}$$

O fluxo difusivo de *momentum* é imposto de forma implícita através da tensão do vento na superfície

$$v \frac{\partial \overline{v_H}}{\partial z} \Big|_{surface} = \vec{\tau} w \quad \text{Eq. 5-21}$$

Já a tensão do vento é calculada através de uma função quadrática, da forma

$$\vec{\tau} w = C_D \rho_a \vec{W} \Big| \vec{W} \Big| \quad \text{Eq. 5-22}$$

onde C_D é o coeficiente de arrasto, que é função da velocidade, ρ_a é a densidade do ar e W é a velocidade do vento a uma altura de 10 m acima da superfície da água.

5.4.2 Condição de contorno no fundo

Da mesma forma, os fluxos advectivos são assumidos nulos no fundo, sendo o fluxo difusivo de *momentum* estimado através da tensão de fundo, que é calculada adotando-se um método de não escorregamento, com uma dependência quadrática em relação à velocidade próxima ao fundo. Assim, o fluxo difusivo é formulado como:

$$v \frac{\partial \overline{v_H}}{\partial z} \Big|_{bottom} = C_D \vec{v_H} \Big| \vec{v_H} \Big| \quad \text{Eq. 5-23}$$

Onde C_D é o coeficiente de arrasto no fundo, que é calculado através da expressão:

$$C_D = \left(\frac{\kappa}{\log\left(\frac{z + z_0^b}{z_0^b}\right)} \right)^2 \quad \text{Eq. 5-24}$$

onde κ é a constante de von Karman e z_0^b é o comprimento da rugosidade de fundo. A dependência quadrática é derivada da relação logarítmica assumida em camadas- limite próximas a fronteiras sólidas, uma vez que as velocidades no fundo estão localizadas a meia altura das células contíguas ao mesmo. Por razões de estabilidade numérica, esse termo é calculado de forma semi-implícita, seguindo procedimento descrito por Backhaus (1985). Nenhum fluxo de salinidade ou temperatura é considerado no fundo.

5.4.3 Condições de contorno laterais fechadas

Nessas fronteiras o domínio simulado é limitado por terra. Na escala de resolução aqui adotada, essa camada é resolvida de modo que uma condição de impermeabilidade e não escorregamento pode ser assumida.

$$\frac{\partial v_H}{\partial \eta} = 0 \quad \text{Eq. 5-25}$$

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{Eq. 5-26}$$

No formalismo adotado no método dos Volumes Finitos, essas condições podem ser implementadas de forma direta, assumindo-se como nulos

tanto o fluxo normal quanto o difusivo de água através das células que estejam em contato com a terra.

5.4.4 Fronteiras abertas

Fronteiras abertas emergem da necessidade de se confinar o domínio a uma dada região de interesse. Os valores das variáveis simuladas têm que ser prescritos nessas fronteiras, de modo a garantir que as informações a respeito do que ocorre na região externa ao domínio sejam transferidas para o interior dele, sem que a solução desejada seja corrompida. Do mesmo modo, ondas geradas no interior do domínio devem ter permissão para sair dele. Deve-se ressaltar que não há condição de fronteira aberta que se possa dizer perfeita, e a mais adequada irá depender do domínio e dos fenômenos que se estejam modelando. Uma recente revisão de fronteiras abertas pode ser encontrada em Palma e Matano (1999). Alguns tipos de fronteiras já foram introduzidas no MOHID 3D (SANTOS, 1995 e MONTERO, 1999) e outras, como o FRS (Flow Relaxation Scheme), estão em desenvolvimento.

5.4.5 Fronteiras móveis

Fronteiras móveis são aquelas que, além de fechadas, mudam de posição com o tempo. Se, por exemplo, há zonas intertidais no interior do domínio simulado, alguns pontos podem, dependendo do estágio da maré, ser cobertos ou não por água. Dessa forma, um algoritmo estável torna-se necessário para se modelar tais zonas e seus efeitos sobre a hidrodinâmica estuarina. Uma exposição detalhada dos algoritmos utilizados no MOHID pode ser encontrada em Martins et al. (1999) e Martins (1999).

6

MÓDULO LAGRANGIANO

6.1 Introdução

Modelos de transporte lagrangianos são úteis para simular processos que possuem gradientes acentuados (ex.: descargas submarinas, processos erosivos decorrentes de dragagens, calibração hidrodinâmica, dispersão de petróleo etc.). O Módulo Lagrangiano do MOHID faz uso do conceito de traçador. A propriedade mais relevante de um dado traçador é sua posição no espaço (x , y , z). Para um físico, um traçador pode ser uma dada massa d'água, já para um geólogo pode ser uma partícula sedimentar ou um grupo de partículas, enquanto que para um químico pode ser uma molécula ou um grupo delas. Já um biólogo pode considerar como tal células do fitoplâncton, ou mesmo um tubarão, de forma que um modelo desse tipo deve ser capaz de simular uma faixa ampla de processos.

O movimento de um traçador pode ser influenciado pelo campo de velocidades gerado pelo Módulo Hidrodinâmico, pela velocidade de espalhamento, gerado pelo Módulo Dispersão de Petróleo, e ainda por oscilações randômicas da velocidade. No estágio presente em que se encontra, o MOHID é capaz de simular a dispersão de petróleo, a evolução da qualidade da água e do transporte de sedimento. Para simular a dispersão de petróleo, o Módulo Lagrangiano interage com o Módulo Dispersão de Petróleo, já para simular a evolução da qualidade da água, o Módulo Lagrangiano faz uso das propriedades descritas pelo Módulo Qualidade da Água. O transporte de sedimento pode estar associado diretamente aos traçadores através do conceito de velocidade de deposição.

A Figura 6-1 representa o fluxo de informação entre o Módulo Lagrangiano e outros módulos do MOHID.

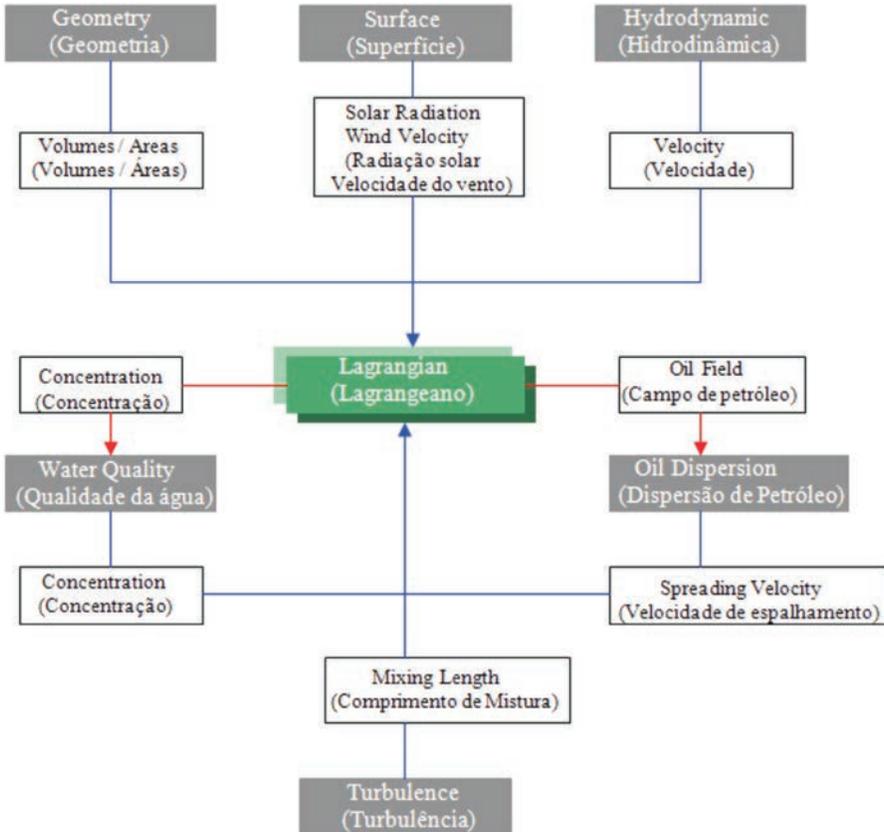


Figura 6-1: Fluxo de informação entre o Módulo Lagrangiano e outros módulos

Outra importante característica do modelo de transporte lagrangiano é sua capacidade de computar o tempo de residência. Isso pode ser bastante útil, por exemplo, no estudo de trocas de massas d'água em baías e estuários.

6.2 Conceito de traçador

Como mencionado acima, o Módulo Lagrangiano do MOHID faz uso do conceito de traçador. Os traçadores são caracterizados pelas coordenadas espaciais, volume e uma lista de propriedades (cada qual com uma dada

concentração). Essas propriedades podem ser as mesmas descritas no Módulo Propriedades da Água, por exemplo. Cada traçador tem um tempo associado, durante o qual movimentos randômicos podem ser executados.

Os traçadores são gerados em sua origem. Traçadores que pertencem à mesma origem têm a mesma lista de propriedades e fazem uso dos mesmos parâmetros na caracterização de seu percurso randômico, como decaimento de coliformes etc. As origens podem diferir na forma como emitem traçadores, havendo três formas distintas de se definirem as origens no espaço:

- “Origens Pontuais” que emitem traçadores em um dado ponto no espaço;
- “Origens do tipo Caixa” que emitem traçadores sobre uma determinada área;
- “Origens do tipo Acidente” que emitem traçadores de forma circular ao redor de um dado ponto.

Por outro lado, há duas diferentes formas pelas quais origens podem emitir traçadores no tempo:

- “Origens contínuas” que emitem traçadores durante um período de tempo;
- “Origens instantâneas” que emitem traçadores em um dado instante de tempo.

Origens podem ser agrupadas em grupos de Origens. Origens que pertencem a um mesmo grupo são da mesma forma agrupadas no arquivo de saída, de modo a facilitar a análise dos resultados.

6.3 Equações

6.3.1 Deslocamento de traçadores

O fator de maior influência na movimentação de um dado traçador é sua velocidade média. As coordenadas espaciais podem ser dadas a partir da definição de velocidade:

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i(x_i, t) \quad \text{Eq. 6-1}$$

onde u representa a velocidade média e x é a posição de dada partícula. A Equação 6-1 pode ser resolvida por um simples método direto

$$x_i^{t+\Delta t} = x_i^t + \Delta t \cdot u_i^t \quad \text{Eq. 6-2}$$

Ordens superiores de precisão exigiriam métodos iterativos. O esquema adotado por Monteiro (1995) possui precisão de segunda ordem. Já Costa (1991) concluiu que esquemas de ordens superiores são importantes sempre que curvaturas no escoamento estão presentes e passos de tempo maiores são utilizados. No entanto, para a maior parte dos escoamentos naturais, métodos explícitos possuem precisão suficiente. A velocidade em qualquer ponto do espaço é calculada fazendo-se uso de uma interpolação linear entre pontos que definem o *grid* hidrodinâmico. O Módulo Lagrangiano permite dividir o cômputo da trajetória de traçadores em frações do passo de tempo adotado no modelo hidrodinâmico.

6.3.2 Difusão turbulenta

O transporte turbulento é responsável pela dispersão dos traçadores. O efeito de vórtices sobre as partículas depende da razão entre o raio deles. Assim, vórtices maiores do que as partículas induzem que essas se movimentem de forma randômica, como explicado na Figura 6-2.

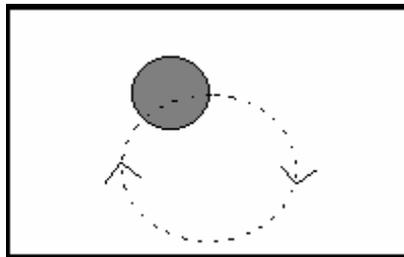


Figura 6-2: Movimento randômico forçado por vórtices de dimensões maiores que a partícula

Já vórtices menores que as partículas induzem à intrusão de matéria na partícula, aumentando seu volume e massa, de acordo com a concentração do traçador que prevelecer no meio, conforme mostrado na Figura 6-3.



Figura 6-3: Movimento randômico forçado por vórtices de dimensões menores que a partícula

O movimento randômico é computado seguindo-se procedimento mostrado em Allen (1982), sendo o deslocamento randômico calculado através do comprimento de mistura e do desvio-padrão da componente turbulenta da velocidade, conforme obtido a partir do modelo de turbulência utilizado no modelo hidrodinâmico. As partículas retêm essa velocidade durante o tempo necessário para realizar um movimento randômico, tempo esse que depende do comprimento de mistura turbulenta local.

O aumento de volume está associado com a turbulência de pequena escala, de forma a ser razoável assumi-la isotrópica. Nessas condições, pequenas partículas mantêm sua forma inicial e seu incremento em volume é função apenas do seu próprio volume.

6.3.3 Taxa de decaimento de massa

A taxa de decaimento de coliformes, a qual pode estar associada com certos traçadores, é computada pela equação

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\ln 10}{T_{90}} C \quad \text{Eq. 6-3}$$

onde C representa a concentração, e T_{90} o intervalo de tempo necessário para que 90% das bactérias morram. Um método implícito é utilizado para resolver numericamente a Equação 6-3, evitando-se dessa forma o eventual surgimento de valores negativos para o número de bactérias.

6.3.4 Caixas de monitoramento

O Módulo Lagrangiano permite monitorar a distribuição de partículas no interior de caixas de monitoramento. Essa peculiaridade pode ser bastante útil para se computar tempos de residência no interior dessas caixas e a origem da água presente no interior delas. O Módulo Lagrangiano “monitora” essas caixas da seguinte forma:

- Em cada instante de tempo, o volume de cada caixa b é calculado por

$$InstBoxVol(b) = \int (h + Z) dx dy$$

- Em cada instante de tempo a origem “o” da água contida em cada caixa de monitoramento é identificada e o volume de cada origem é armazenado na variável *InstVolumeByOrigin* (b, o):

$$InstVolumeByOrigin(b, o) = \sum_o Vol_j^b$$

- No caso de emissões instantâneas nas caixas, essas contribuições são integradas, fornecendo a contribuição integrada no tempo, *IntgVolumeByOrigin*(b, o)

$$IntgVolumeByOrigin(b, o) = \int InstVolumeByOrigin(b, o) dt$$

Uma medida do tempo de residência da água emitida para o interior da caixa “o” na caixa “b” é dada por:

$$ResidenceTimePerBox(b, o) = IntgVolumeByOrigin(b, o) / IntialVol(o)$$

Adicionando-se todos os valores obtidos para as caixas de monitoramento que estejam presentes no estuário, obtém-se o tempo de residência no interior de todo o sistema.

$$ResidenceTime(o) = \sum_b ResidenceTimePerBox(b, o)$$

Esses valores também permitem computar como cada caixa de monitoramento é influenciada por cada caixa de emissão:

$$InfluenceOverBox(b, o) = IntgVolumeByOrigin(b, o) / InitialVol(b)$$

No caso de emissões contínuas, o tempo de residência pode ser calculado por

$$ResidenceTimePerBox(b, o) = InstVolumeByOrigin(b, o) / DischargeRate(o)$$

De novo, a adição dos valores obtidos para o tempo de residência de cada caixa fornece o tempo de residência para todo o sistema.

A saída de dados pode ser feita de quatro maneiras distintas:

- Série temporal no formato ASCII, com colunas para cada caixa de monitoramento e para cada passo de tempo. Para cada caixa de monitoramento um arquivo é gerado, no qual a primeira coluna representa o volume da caixa, enquanto as demais representam contribuições para essa caixa vindas de cada origem. Tanto os valores instantâneos quanto os integrados são escritos na forma de séries temporais das variáveis, no formato ASCII;
- Série temporal no formato ASCII da variável *ResidencetimeperBox(b,o)*;
- Matriz do tipo HDF para cada origem e cada instante de saída gerado pelo modelo. A relativa contribuição de cada caixa de emissão, "o", para volumes instantâneos em cada caixa de monitoramento, "b", é escrita como um percentual do volume da caixa de monitoramento, como:

$$Matrix(b,o) = 100 * InstVolumeByOrigin(b,o) / InstBoxVol(b)$$

- Matriz do tipo HDF para todas as origens, uma para cada instante de saída gerado pelo modelo. A matriz de saída é preenchida, dependendo da contribuição instantânea (em volume) de partículas para uma dada caixa de monitoramento. O volume que for "perdido" nesse procedimento é preenchido com 0 (água doce).

7

MÓDULO PETRÓLEO

7.1 Introdução

A previsão e a simulação da trajetória e degradação de manchas de petróleo são essenciais para a elaboração de planos de resposta e contingência a derramamentos, assim como para a avaliação de impactos ambientais que possam decorrer de derramamentos.

Com o objetivo de se prever o comportamento de derivados de petróleo eventualmente derramados em zonas costeiras, um modelo de degradação de petróleo foi desenvolvido no MOHID, capaz de prever a evolução e o comportamento de processos (incluindo transporte e dispersão) e propriedades de derivados de petróleo em água. Alguns procedimentos de resposta a derramamentos também foram integrados a esse modelo.

7.2 Implementação

Tanto a densidade quanto a viscosidade, assim como diferentes processos, estão incluídos no Módulo Petróleo, tais como espalhamento, evaporação, dispersão, sedimentação, dissolução, emulsificação, aporte de petróleo em praias e técnicas de remoção.

Diferentes métodos alternativos foram programados para a previsão desses processos. Por essa razão, ao utilizar o modelo, há mais de uma forma de simular os processos, dependendo, por exemplo, das características da malha computacional ou da magnitude da mancha que se está simulando.

O Módulo Degradação faz uso principalmente dos Módulos 3D Hidrodinâmico e 3D Lagrangiano. O Módulo Hidrodinâmico simula o campo de velocidades necessário ao Módulo Lagrangiano, para calcular a trajetória da mancha de petróleo. Essas trajetórias são computadas assumindo-se que a mancha de petróleo pode ser idealizada como um grande número de partículas que se movem de forma independente na água. Propriedades da água e condições atmosféricas são introduzidas no Módulo Lagrangiano, sendo utilizadas pelo Módulo Petróleo para a determinação de processos e propriedades da própria mancha. Com exceção do espalhamento e o aporte de petróleo em praias, todos os processos de degradação e propriedades são considerados como uniformes para todos os traçadores, como, por exemplo, propriedades da água e condições atmosféricas, as quais são presumidas como as que prevaleçam no local de origem do acidente.

Como mencionado anteriormente, o movimento dos traçadores de petróleo pode ser influenciado pelo campo de velocidades, pelo vento (determinado no Módulo Superfície), pela velocidade de espalhamento (determinada no Módulo Petróleo) e pelas velocidades randômicas.

A temperatura do petróleo é entendida ser a mesma da água, negligenciando-se a radiação solar e qualquer outro processo de transferência de energia que possa vir a influenciar a sua temperatura.

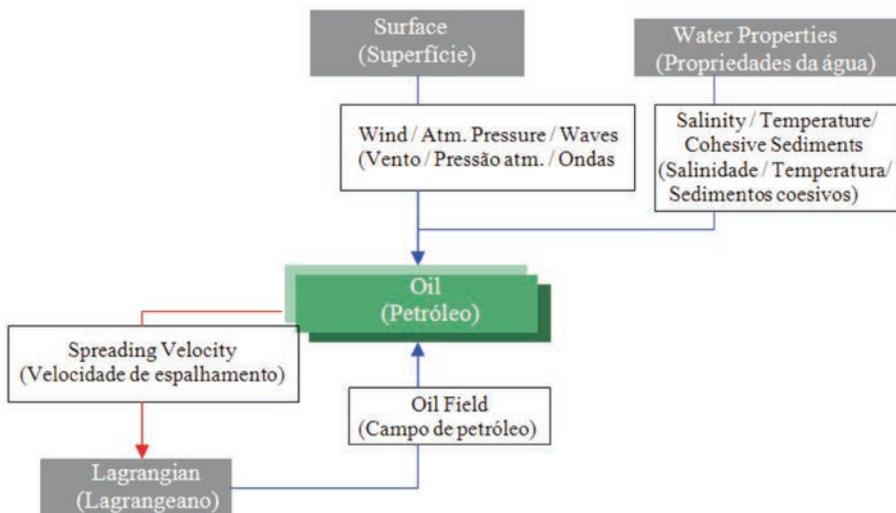


Figura 7-1 Fluxo de informação entre o Módulo Petróleo e outros módulos

7.3 Equações

7.3.1 Espalhamento

No caso de se ter um acidente com derramamento instantâneo, a área inicial da mancha é determinada pela equação deduzida a partir das soluções de Fay (1969). Uma vez que a fase inicial de espalhamento (gravidade-fase inercial) é muito pequena, a área inicial é calculada a partir do momento em que essa fase termina e a fase gravidade-viscosidade se inicia:

$$A_0 = \pi \frac{k_2^4}{k_1^2} \left(\frac{\Delta g V_0^5}{\nu_w} \right)^{1/6} \quad \text{Eq. 7-1}$$

onde :

A_0 – área inicial

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

ρ_w - densidade da água

ρ_o - densidade do petróleo

g – aceleração da gravidade

V_0 – volume de petróleo derramado

ν_w – viscosidade cinemática da água

$k_1 = 0.57$ and $k_2 = 0.725$, como recomendado por Flores et al. (1999).

Dois diferentes algoritmos foram implementados para estimar-se o espalhamento da mancha gerada em dado derramamento. Um dos algoritmos determina as velocidades randômicas u_d e v_d (com distribuição uniforme) dentro da faixa $[-U_r, U_r]$, $[-V_r, V_r]$ (nas direções x e y , respectivamente), sendo proporcional aos coeficientes de difusão, que são calculados assumindo-se que o espalhamento dos traçadores lagrangianos é equivalente às fórmulas da solução de Fay (1969). A seguinte relação entre os coeficientes D_x e D_y e a faixa de flutuação das velocidades randômicas, $[-U_r, U_r]$, $[-V_r, V_r]$ é adotada conforme Leitão (1996):

$$U_r = \sqrt{\frac{2D_x}{\Delta t}} \quad \text{Eq. 7-2}$$

$$V_r = \sqrt{\frac{2D_y}{\Delta t}} \quad \text{Eq. 7-3}$$

Velocidades randômicas são, então, determinadas conforme sugerido por Proctor et al.(1994):

$$u_d = R_1 \cos(2\pi R_2) \cdot U_r \quad \text{Eq. 7-4}$$

$$v_d = R_1 \text{sen}(2\pi R_2) \cdot V_r \quad \text{Eq. 7-5}$$

onde R_1 e R_2 são números aleatórios entre 0 e 1.

A única fase de fato simulada é a de gravidade-viscosidade, a partir das soluções propostas por Fay, nas quais os coeficientes D_x e D_y têm a seguinte formulação (o modelo aqui adotado faz uso da solução numérica dessa equação):

$$D_x = D_y = \frac{\pi k_2^2}{16} \left(\frac{\Delta g V^2}{v_w^{1/2}} \right)^{1/3} \cdot \frac{1}{\sqrt{t}} \quad \text{Eq. 7-6}$$

onde:

V - volume da mancha de petróleo

t – tempo após o derrame

O outro algoritmo proposto para simular o espalhamento de petróleo é baseado na diferença de espessura observada dentro do filme que se forma em contato com a água, presumindo-se que um gradiente de espessura pode gerar uma força na direção de menor espessura. Dessa forma, um traçador irá se deslocar da célula computacional com maior espessura para a de menor espessura.

Essa formulação faz uso de um coeficiente para se aproximar da solução de Fay, com o objetivo de aumentar a sensibilidade dos resultados a alguns fatores, tais como diferentes densidades de petróleo, originando, assim, comportamentos diferenciados. O espalhamento é dado por:

$$k = k_1 \cdot \frac{\Delta^{1,6} g V^2}{v_w^{1/6}} \quad \text{Eq. 7-7}$$

onde k_1 é um parâmetro introduzido pelo usuário, com um valor padrão de 10.0.

Dessa forma, no Módulo Petróleo as velocidades são calculadas nas faces dos volumes de controle, onde petróleo está presente, tanto na direção x quanto na direção y :

$$u_{cell} = k \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} \quad \text{Eq. 7-8}$$

$$v_{cell} = k \cdot \frac{\Delta h}{\Delta y} \quad \text{Eq. 7-9}$$

onde $\frac{\Delta h}{\Delta x}$ e $\frac{\Delta h}{\Delta y}$ são os gradientes de “espessura” de cada célula, respectivamente nas direções x e y . Subsequentemente, no Módulo Lagrangiano, velocidades de traçadores são interpoladas, com base nas velocidades nas faces das células e na posição dos traçadores.

Se a espessura média se torna muito fina – menor do que um valor entre 0.1 e 0.01, dependendo da viscosidade do derivado de petróleo considerado -, o espalhamento é interrompido, de acordo com Reed (1989).

7.3.2 Densidade

A densidade pode ser estimada por

$$\rho_e = F_{wv} \cdot \rho_w + \rho_{oil}(1 - F_{wv})(1 + c_{DE}F_e)[1 - c_{DT}(T - T_0)] \quad \text{Eq. 7-10}$$

onde ρ_e é a densidade de emulsão, T a temperatura, ρ_{oil} é a densidade de petróleo fresco à temperatura de referência T_0 , ρ_w é a densidade da água, c_{DE} e c_{DT} são constantes empíricas, para as quais NOAA (1994) recomenda respectivamente os valores de 0.18 e 8×10^{-4} .

A densidade inicial de petróleo é obtida da densidade API. Somente derivados com densidades inferiores são modelados, pois os demais irão necessariamente decantar no meio.

7.3.3 Viscosidade

A viscosidade pode ser alterada através de três processos principais: oscilações da temperatura, evaporação e emulsificação. A influência da temperatura é calculada através da correlação de Andrade, dada por:

$$\mu = \mu_0 e^{c_T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)} \quad \text{Eq. 7-11}$$

onde μ é a viscosidade à temperatura T , μ_0 é a viscosidade inicial à temperatura de referência T_0 e c_T é uma constante empírica que, segundo recomendação da NOAA (1994) deve assumir o valor de 5000 K.

Alterações da viscosidade devido à emulsificação são definidas pela equação de Mooney (1951) como:

$$\mu = \mu_0 e^{\left[\frac{c_V F_{wv}}{(1-c_M F_{wv})} \right]} \quad \text{Eq. 7-12}$$

onde F_{wv} é a fração de volume de água submetida à emulsificação, c_V é uma constante empírica adimensional (MACKAY et al. (1980) recomendam o valor de 2.5) e c_M é uma constante adicional de Mooney, assumindo o valor de 0.65.

O efeito da evaporação sobre a viscosidade é calculado pela equação (MACKAY et al., 1980):

$$\mu = \mu_0 \cdot e^{(c_E F_{em})} \quad \text{Eq. 7-13}$$

onde F_{em} é a fração de massa de petróleo evaporada, enquanto a constante empírica adimensional c_E varia de acordo com o petróleo considerado, entre 1 e 10, com valores mais altos para derivados mais viscosos. Nesse modelo, quando a 15 °C, o petróleo fresco possui uma viscosidade maior do que 38 cSt, c_E assume sempre o valor de 10. No caso de petróleos menos viscosos, c_E é estimada através de uma regressão polinomial de segunda ordem, dada por:

$$c_E = -0.0059 \cdot V_{cin15}^2 + 0.4461 \cdot V_{cin15} + 1.413 \quad \text{Eq. 7-14}$$

onde V_{cin15} é a viscosidade cinemática a 15 °C. As três equações anteriores podem ser reunidas em uma única, como:

$$\mu = \mu_0 \cdot e^{\left[(c_E F_{em}) + \frac{c_V F_{wv}}{(1-c_M F_{wv})} + c_T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]} \quad \text{Eq. 7-15}$$

7.3.4 Evaporação

No MOHID, o processo de evaporação do petróleo pode ser estimado de duas formas distintas: através de um método analítico, também conhecido como método da exposição evaporante, desenvolvido por Stive & Mackay (1984), e por uma mais recente metodologia proposta por Fingas (1998).

O método da exposição evaporante é dado pela fórmula:

$$\frac{dF_e}{dt} = \frac{K_e A_s}{V_0} \cdot \exp\left(A - \frac{B}{T} (T_0 + T_G F_e)\right) \quad \text{Eq. 7-16}$$

onde F_e é a fração de volume de petróleo evaporada, T é a temperatura do petróleo, A_s é a área compreendida pelo filme de petróleo, V_0 é o volume inicial, K_e é o coeficiente de transferência de massa, determinado por uma fórmula simples, proposta por Buchanan & Hurford (1988):

$$K_e = 2.5 \times 10^{-3} W^{0.78} \quad \text{Eq. 7-17}$$

onde A e B são constantes empíricas, T_0 é a temperatura inicial de ebulição e T_G é o gradiente da curva de destilação. Todos esses parâmetros dependem do tipo de petróleo. Nesse modelo eles são estimados, e tanto T_0 quanto T_G são obtidas da densidade API, de acordo com a versão 1.1 do modelo ADIOS (NOAA, 1994) como $A = 6.3$ e $B = 10.3$.

Para petróleos crus:

$$T_0 = 532.98 - 3.1295 \cdot API \quad \text{Eq. 7-18}$$

$$T_G = 985.62 - 13.597 \cdot API \quad \text{Eq. 7-19}$$

E para petróleos refinados:

$$T_0 = 654.45 - 4.6588 \cdot API \quad \text{Eq. 7-20}$$

$$T_G = 388.19 - 3.8725 \cdot API \quad \text{Eq. 7-21}$$

Fingas propôs outro método de cálculo da evaporação. Ele propôs uma formulação simplificada, na qual os fatores relevantes são tempo e temperatura. Para muitos tipos de petróleo, Fingas determinou equações empíricas, nas seguintes formas:

$$\%Ev = (\alpha + \beta \cdot T) \ln(t) \quad \text{Eq. 7-22}$$

ou

$$\%Ev = (\alpha + \beta \cdot T) \sqrt{t} \quad \text{Eq. 7-23}$$

onde %Ev é o percentual (em peso) de petróleo evaporado, enquanto α e β são constantes empíricas, específicas para cada tipo de petróleo, T é a temperatura do petróleo e t é o tempo decorrido, expresso em minutos, após o derramamento. Se dados empíricos são desconhecidos, equações genéricas podem ser utilizadas:

$$\%Ev = [(0.165(\%D) + 0.045 \cdot (T - 15))] \ln(t) \quad \text{Eq. 7-24}$$

ou

$$\%Ev = [(0.0254(\%D) + 0.01 \cdot (T - 15))] \sqrt{t} \quad \text{Eq. 7-25}$$

onde %D é o percentual (em peso) destilado a 180 °C. Equações quadráticas são utilizadas em alguns petróleos refinados e para simulações de curto período (1 a 2 dias).

7.3.5 Emulsificação

Esse processo consiste na incorporação de água ao petróleo. Ele normalmente se inicia após certa quantidade de petróleo ter evaporado. Uma taxa de emulsificação constante é utilizada, que significa o percentual de petróleo evaporado antes do início da emulsificação. Quando a emulsificação se inicia, a incorporação de água ao petróleo pode ser simulada por dois diferentes processos. Uma equação largamente utilizada, proposta por Mackay et al. (1980), é implementada no modelo, como:

$$\frac{dF_{wv}}{dt} = K_w (1 + W)^2 \left(1 - \frac{F_{wv}}{F_{wv}^{final}} \right) \quad \text{Eq. 7-26}$$

onde F_{wv} é a fração de volume de água incorporado na emulsificação, F_{wv}^{final} é a fração de volume final incorporada devido à emulsificação e KW é uma constante empírica introduzida pelo usuário. Usualmente essa constante assume valores entre 1.0×10^{-6} e 2.0×10^{-6} . O valor padrão utilizado no MOHID é 1.6×10^{-6} , que também é adotado no modelo ADIOS (NOAA, 1994). Um outro algoritmo utilizado baseia-se na equação de Rasmussen (1985):

$$\frac{dF_{wv}}{dt} = R_1 - R_2 \quad \text{Eq. 7-27}$$

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

$$R_1 = \frac{K_1}{\mu_0} (1 + W)^2 (F_{wv}^{final} - F_{wv}) \quad \text{Eq. 7-28}$$

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

$$R_2 = \frac{K_2}{Asph \cdot Wax \cdot \mu_0} F_{wv} \quad \text{Eq. 7-29}$$

onde $Asph$ é o conteúdo de asfalto no petróleo (%), Wax é o conteúdo em graxa (%), enquanto K_1 e K_2 são constantes determinadas conforme Rasmussen (1985):

$$K_1 = 5 \times 10^{-7} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}; \quad K_2 = 1.2 \times 10^{-7} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}.$$

7.3.6 Dispersão

Esse é o processo através do qual gotículas de petróleo são arrastadas pela coluna d'água. Há dois diferentes métodos de se prever esse processo de degradação. Um deles é o de Delvigne & Sweeney (1988) que faz uso da fórmula:

$$\frac{dm_d}{dt} = c_{oil} \cdot D_{ba}^{0.57} \cdot f_s \cdot F_{wc} \cdot d_0^{0.7} \cdot \Delta d \quad \text{Eq. 7-30}$$

Essa equação estima a taxa de transferência de massa por unidade de tempo, onde f_s é a fração de superfície de água coberta por petróleo (considerada igual à adição das áreas emulsionadas àquelas que contêm somente petróleo); d_0 é o diâmetro das gotículas; Δd é a faixa de variação desse diâmetro em torno de d_0 (o modelo assume faixa de 5 – 70 microns; gotículas maiores tendem a migrar para a superfície (NOAA, 1994)); c_{oil} é um parâmetro determinado experimentalmente, que depende do tipo de petróleo. Esse modelo faz uso de uma regressão logarítmica, baseada na viscosidade cinemática, dada por:

$$c_{oil} = -312.25 \cdot \ln(V_{cin}) + 2509.8 \quad \text{Eq. 7-31}$$

onde V_{cin} é a viscosidade cinemática do petróleo (se essa regressão gera valores negativos, c_{oil} é considerada nula).

D_{ba} é a dissipação de energia de onda por unidade de área, que pode ser calculada por:

$$D_{ba} = 0.0034 \rho_w g H_{rms}^2 \quad \text{Eq. 7-32}$$

onde H_{rms} é dada por:

$$H_{rms} = \frac{1}{\sqrt{2}} H_0 \quad \text{Eq. 7-33}$$

onde H_0 é a altura da onda, F_{wc} é a fração da superfície do mar coberta por espuma por unidade de tempo, dada por:

$$F_{wc} = \frac{C_b (W - W_i)}{T_w} \quad \text{Eq. 7-34}$$

onde $C_b = 0,032 \text{ s.m}^{-1}$, W_i é a velocidade do vento para iniciar a formação de espuma (4 m.s^{-1}); e T_w é o período da onda. Se período e altura da onda são desconhecidos, podem empiricamente ser determinados

como função da velocidade do vento, de acordo com a formulação adotada no modelo ADIOS (NOAA, 1994), dada por:

$$H_0 = 0.243 \frac{W^2}{g} \quad \text{Eq. 7-35}$$

$$T_w = 8.13 \frac{W}{g} \quad \text{Eq. 7-36}$$

Uma vez que a energia turbulenta é difícil de determinar, alguns algoritmos simplificadores têm sido desenvolvidos para aplicar-se à dispersão vertical, expressa como função do quadrado da velocidade do vento. Um desses algoritmos – a formulação proposta por Mackay et al. (1980) – é adotada nesse modelo:

$$\frac{dm_d}{dt} = 0.11 m_{oil} \frac{(1+W)^2}{1+50\mu^{1/2}h\sigma} \quad (\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}) \quad \text{Eq. 7-37}$$

onde m_{oil} é a massa de petróleo remanescente na superfície, μ é a viscosidade dinâmica do petróleo, (cP); h é a espessura do filme de petróleo (cm), W é a velocidade do vento ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$), e σ é a tensão superficial na interface petróleo-água ($\text{dyne}\cdot\text{cm}^{-1}$).

7.3.7 Sedimentação

Apesar de o processo de decantação do petróleo ser relativamente complicado e difícil de ser estimado, uma formulação desenvolvida pela Science Application International (PAYNE et al., 1987) é adotada no MOHID:

$$\frac{dm_{sed}}{dt} = 1.3 \sqrt{\frac{E}{V_w}} K_a \cdot C_{oil} \cdot C_{sed} \cdot z_i \cdot A_s \quad \text{Eq. 7-38}$$

Essa equação fornece a massa de petróleo sedimentado por unidade de tempo ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$), onde V_w é a viscosidade dinâmica da água ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$), K_a é o parâmetro de aderência, assumindo valor de $1 \times 10^{-4} \text{ m}^{-4}\cdot\text{kg}^3\cdot\text{s}^{-1}$ e z_i é a profundidade de intrusão de gotículas de petróleo devido à quebra de ondas, dada por Delvigne & Sweeney (1988):

$$z_i = 1.5 \cdot H_0 \quad \text{Eq. 7-39}$$

onde E é a taxa de dissipação de energia promovida pela superfície da água ($\text{J}\cdot\text{m}^3\cdot\text{s}^{-1}$), sendo estimada a partir da dissipação de energia da onda (D_{ba}), já previamente explicada na seção que tratou dos processos dispersivos:

$$E = \frac{D_{ba}}{z_i \cdot T_w} \quad \text{Eq. 7-40}$$

onde C_{sed} é a concentração de sedimento na coluna d'água ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$) e C_{oil} é a concentração de gotículas de petróleo na coluna d'água ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$). Essa concentração pode ser determinada pela taxa de dispersão proposta por Delvigne & Sweeney (1988), já explicada na seção que tratou dos processos dispersivos, integrando-se essa taxa no período da onda e na profundidade de intrusão das gotículas de petróleo:

$$\frac{dC_{oil}}{dt} = \frac{dm_d}{z_i} \quad \text{Eq. 7-41}$$

Somente gotículas com diâmetros entre 70 e 200 microns são consideradas no processo de sedimentação. Gotículas acima dessa faixa são menos prováveis de aderir a partículas sedimentares, enquanto que as que estiverem abaixo já terão tido seu comportamento estimado através dos processos dispersivos.

7.3.8 Dissolução

Esse processo pode ser quantificado através do método de Cohen, no qual a dissolução é estimada por:

$$\frac{dDiss}{dt} = K \cdot f_s \cdot A_s \cdot S \quad (\text{g.h}^{-1}) \quad \text{Eq. 7-42}$$

onde f_s é a fração da superfície coberta por petróleo (considerada igual à adição das áreas emulsionadas àquelas que contêm somente petróleo); A_s é a superfície (m^2) do filme de petróleo e S é a solubilidade de petróleo em água. Huang & Monastero (1982) propuseram uma solução analítica para uma dada solubilidade típica de petróleo (esse modelo utiliza a solução numérica da seguinte equação):

$$S = S_0 \cdot e^{-\alpha t} \quad \text{Eq. 7-43}$$

onde S_0 é a solubilidade de petróleo fresco (30 g.m^3), α é uma constante de decaimento, t é o tempo transcorrido após o derramamento e K é o coeficiente de transferência de massa devido à dissolução (0.01 m.h^{-1}).

7.3.9 Aporte de petróleo em praias

Quando o petróleo derramado chega à região costeira, eventualmente ele pode chegar a praias. Esse modelo estima a quantidade de petróleo que aporta a praias, quando o usuário predefine uma probabilidade de esse evento ocorrer, considerando-se diferentes zonas costeiras.

7.3.10 Técnicas de remoção

Algumas técnicas de remoção, como dispersão química e limpeza mecânica, também são incluídas no modelo.

7.3.10.1 Dispersão química

A aplicação de dispersantes químicos pode ser simulada, desde que a eficiência do dispersante, a percentagem do filme de petróleo submetida à aplicação e o período de tempo dessa aplicação sejam conhecidos. A taxa de dispersão química é prevista através da seguinte equação:

$$\frac{dm_{Qchem}}{dt} = \frac{m_{oil} \cdot \left(\frac{\%A_{spr}}{100} \right) \cdot \left(\frac{\%Ef}{100} \right)}{\Delta t} \quad \text{Eq. 7-44}$$

onde m_{oil} é a massa instantânea de petróleo, $\%A_{spr}$ é o percentual da área do filme de petróleo submetida à aplicação, e $\%Ef$ é a eficiência do produto químico utilizado.

7.3.10.2 Remoção mecânica

A remoção mecânica também é simulada por um certo período de tempo, onde a taxa de volume total ou o volume total de emulsão removida têm que ser conhecidos. Se a taxa de remoção da emulsão é desconhecida, ela pode ser obtida a partir do volume total de emulsão removida mecanicamente durante o período da operação, por:

$$\frac{dV_{mec}}{dt} = \frac{V_{TotMec}}{1000 \cdot \Delta t} \quad \text{Eq. 7-45}$$

onde V_{TotMec} é o volume total de emulsão removida mecanicamente ($m^3 \cdot h^{-1}$) e $\frac{dV_{mec}}{dt}$ é a taxa de remoção mecânica do volume de emulsão presente. Após a conversão dessa taxa para unidades de $m^3 \cdot s^{-1}$, a taxa de volume de petróleo removido é estimada por:

$$\frac{dV_{OilMec}}{dt} = \frac{dV_{mec}}{dt} \cdot (1 - Y) \quad \text{Eq. 7-46}$$

Onde Y é o conteúdo de água na emulsão água + petróleo.

8

MÓDULO PROPRIEDADES DA ÁGUA

8.1 Introdução

O Módulo Propriedades da Água coordena a evolução das propriedades da água, fazendo uso da abordagem euleriana. Essa coordenação inclui o transporte devido aos fluxos advectivo e difusivo, aportes de rios e descargas antropogênicas, trocas com o sedimento de fundo e com a atmosfera, sedimentação de material particulado e fontes e sorvedouros internos (qualidade da água).

Atualmente, o MOHID é capaz de simular 24 propriedades da água: temperatura, salinidade, fitoplâncton, zooplâncton, fósforo orgânico particulado, fósforo orgânico dissolvido refratário, fósforo orgânico dissolvido não refratário, fósforo inorgânico, nitrogênio orgânico particulado, nitrogênio orgânico refratário, nitrogênio orgânico não refratário, amônia, nitrato, nitrito, demanda biológica de oxigênio, oxigênio, sedimentos coesivos, bactérias ciliadas, arsênico particulado, arsênico dissolvido, coliformes fecais, inclusive no estado larval. Qualquer nova propriedade pode muito facilmente ser adicionada, graças à programação objeto-orientada utilizada no MOHID.

No Módulo Qualidade da Água, os ciclos do nitrogênio, oxigênio e fósforo contemplam os termos fonte e sorvedouros. A Figura 8-1 representa o fluxo de informação presente entre o Módulo Propriedades da Água e os outros módulos.

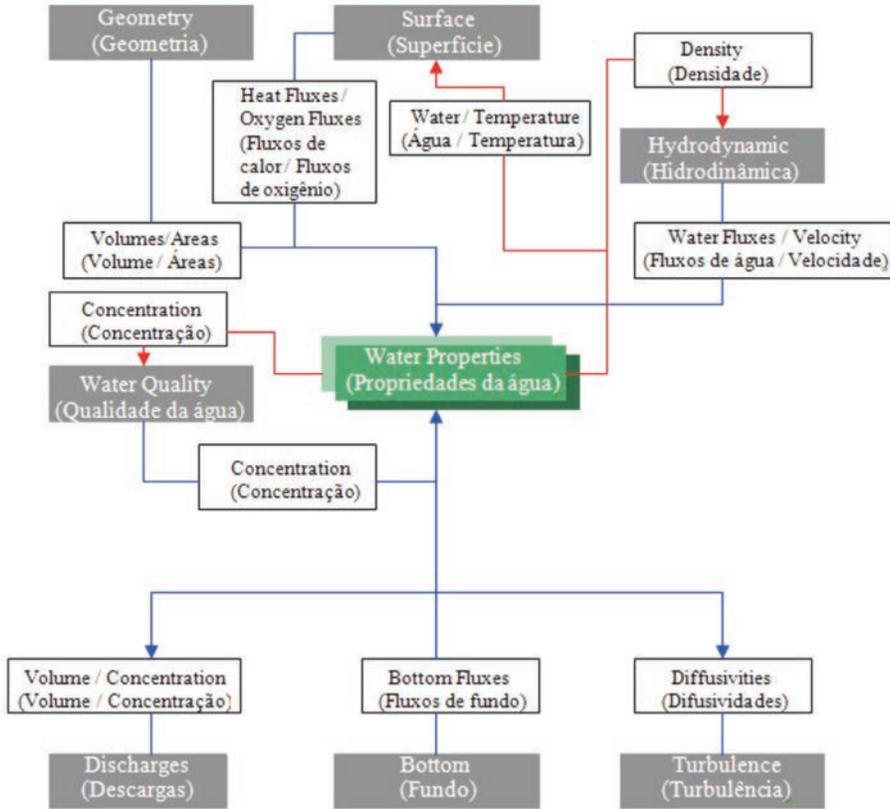


Figura 8-1: Fluxo de informação presente entre o Módulo Propriedades da Água e outros módulos

8.2 Equações

8.2.1 Transporte

O transporte devido aos fluxos advectivo e difusivo, para uma dada propriedade A , é resolvido pela seguinte equação:

$$\partial_t A = -\partial_x(uA) - \partial_y(vA) - \partial_z(wA)$$

$$+ \partial_x(v'_H \partial_x A) + \partial_y(v'_H \partial_y A) + \partial_z((v'_t + v'_A) \partial_z A) \quad \text{Eq. 8-1}$$

onde u , v e w são as componentes da velocidade respectivamente nas direções x , y e z , v'_H and v'_t são os coeficientes de difusividade horizontal e vertical, e v'_A o coeficiente de difusividade molecular.

A evolução no tempo de A é dada pelo balanço entre o transporte advectivo gerado pelo escoamento médio, processos de mistura de natureza turbulenta, e ainda por possíveis sorvedouros e fontes que a propriedade considerada possa ter.

8.2.2 Densidade

A densidade ρ é calculada como função da temperatura e salinidade, através da equação de estado proposta por Leenderstsee e Liu (1978):

$$\rho = (5890 + 38T - 0.375T^2 + 3S) /$$

$$((1779.5 + 11.25T - 0.0745T^2) - (3.8 + 0.01T)S +$$

$$0.698(5890 + 38T - 0.375T^2 + 3S))$$

Eq. 8-2

Essa é uma aproximação para águas rasas da equação da UNESCO (UNESCO, 1981), de mais ampla utilização.

9

MÓDULO QUALIDADE DA ÁGUA

9.1 Introdução

Hoje em dia, esforços no sentido de desenvolver a modelagem ecológica têm sido feitos em diversos países, já que o manejo da qualidade de água tornou-se uma grande preocupação. Fransz et al. (1991) atentaram para o fato de que a maior parte da nova geração de modelos tende a ser muito mais diversificada do ponto de vista biológico e químico do que os primeiros modelos que foram construídos, uma vez que se tornou reconhecido que não se pode simular um ecossistema em detalhes, sem que se trate com profundidade o ciclo completo da matéria orgânica.

Esses processos não são estranhos às preocupações causadas pela eutrofização e suas consequências. Apesar de ser senso comum a necessidade de diminuir o aporte de nutrientes para os oceanos, por exemplo, ainda não se tem base científica para definir a exata medida dessa redução.

Um modo apropriado de se tratar o problema da eutrofização e da avaliação de cenários de redução da carga de nutrientes, por exemplo, é simular o fenômeno através de modelos matemáticos. É provavelmente correto assumir que qualquer modelo ecológico, que seja suficientemente complexo em sua estrutura interna e que contemple as múltiplas inter-relações presentes em níveis tróficos inferiores, estará próximo de uma resposta, se escalas de tempo apropriadas forem adotadas.

O modelo ecológico incluído no MOHID é adaptado do desenvolvido pela EPA (1985), e pertence à categoria de modelos de simulação de ecossistemas, isto é, constitui-se em conjuntos de equações de conservação que descrevem de forma tão adequada quanto possível o funcionamento e as inter-relações entre os componentes de um

ecossistema real. Não é correto dizer que o modelo descreve os níveis tróficos inferiores com grande precisão. Na realidade, o ciclo microbiano, que tem papel determinante na reciclagem do esgoto orgânico, por exemplo, é bastante simplificado nesse modelo.

Níveis tróficos inferiores aparecem em praticamente todos os modelos de simulação de ecossistemas marinhos, uma vez que ao menos um compartimento, o “fitoplâncton”, se faz necessário para conduzir a ciclagem de matéria orgânica. Alguns modelos anteriores aplicados ao Mar do Norte eram de compartimento único, especialmente quando se direcionavam para simular o crescimento de fitoplâncton em relação à pressão de seu consumo (tratada como uma variável forçante). Tanto a influência das equações de Lotka-Volterra – desenvolvidas nos anos 20 – como as descobertas no campo da fisiologia vegetal (relação entre luz e fotossíntese) eram discerníveis. Não foi muito antes de conceitos como “nutrientes limitantes” e zooplânctons herbívoros, assim como variáveis de estado, serem incorporados em modelos de simulação (FRANSZ et al., 1991).

9.2 Modelo geral

Fransz et al. (1991) definiram as equações gerais de conservação para um modelo idealizado de ecossistema marinho. Para o MOHID foram adaptadas suas definições e estabelecido um sistema que consiste em cinco variáveis de estado, incluindo fitoplâncton, zooplâncton, nutriente dissolvido, matéria orgânica na forma pelágica, matéria orgânica na fase bêntica, bactérias pelágicas e bactérias bênticas.

$dN/dt = - f_{12}$ (incorporação pelo fitoplâncton) – f_{15} (incorporação por bactéria pelágica) + f_{51}

(mineralização pelágica) + f_{61} (mineralização bêntica) + f_{01} (excreção por zooplâncton) + advecção e difusão.

$dP/dt = +f_{12}$ (crescimento fitoplanctônico) – f_{23} (excreção de pOM) – $(f'_{23} + f'_{24})$ (mortalidade natural) – f_{20} (consumo de fitoplâncton) – f_{24} (decantação de fitoplâncton) + advecção e difusão.

$$dZ/dt = +f_{20} \text{ (crescimento de zooplâncton)} - f_{01} \text{ (excreção de nutrientes)} - f_{04} \text{ (excreção de bOM)} - f_{03} \text{ (excreção de pOM)} + \text{advecção e difusão.}$$

$$dpOM/dt = +f_{23} \text{ (excreção de pOM)} + f'_{23} \text{ ((1-a) mortalidade natural de fitoplâncton)} + f_{53} \text{ ((1-b) mortalidade natural de bactérias pelágicas)} + f_{03} \text{ ((1-c) pelotas fecais e detritos oriundos de níveis tróficos superiores)} - f_{35} \text{ (degradação de pOM por bactérias pelágicas)} + \text{advecção e difusão.}$$

$$dbOM/dt = +f'_{24} \text{ ((a) mortalidade natural de fitoplâncton)} + f_{24} \text{ (precipitação de fitoplâncton)} + f_{54} \text{ ((b) mortalidade natural de bactérias pelágicas)} + f_{64} \text{ (mortalidade natural de bactérias bênticas)} + f_{04} \text{ ((c) pelotas fecais e detritos oriundos de níveis tróficos superiores)} - f_{46} \text{ (degradação de bOM por bactérias bênticas)} + \text{advecção e difusão.}$$

$$dpB/dt = +f_{35} \text{ (degradação de pOM)} + f_{15} \text{ (incorporação de N)} - f_{51} \text{ (mineralização pelágica)} - (f_{53} + f_{54}) \text{ (mortalidade natural)} + \text{advecção e difusão.}$$

$$dpB/dt = +f_{46} \text{ (degradação de bOM)} - f_{61} \text{ (mineralização bêntica)} - f_{64} \text{ (mortalidade natural).}$$

onde N representa a concentração de nutrientes inorgânicos, P a concentração de fitoplâncton, Z a concentração de zooplâncton, pOM a concentração de matéria orgânica pelágica, bOM a concentração de matéria orgânica bêntica, pB a concentração de bactérias pelágicas, bB a concentração de bactérias bênticas e a , b e c são fatores com valores compreendidos entre 0 e 1.

O processo de produção primária, impulsionado pela energia luminosa, é o motor necessário a todas as transferências de massas que ocorrem entre os compartimentos biológicos. Zooplâncton, que nos primeiros modelos que foram construídos não era considerado, hoje se tornou uma importante variável de estado.

O Módulo Qualidade da Água do MOHID é um modelo ecológico de dimensão zero, que pode ser utilizado pelos módulos de transporte, tanto euleriano quanto lagrangiano. Os ciclos de nitrogênio, de fósforo e de oxigênio também são incluídos. Uma breve descrição desses ciclos é apresentada nas próximas seções. A Figura 9-1 representa o fluxo de informação entre o Módulo Qualidade da Água e outros módulos.

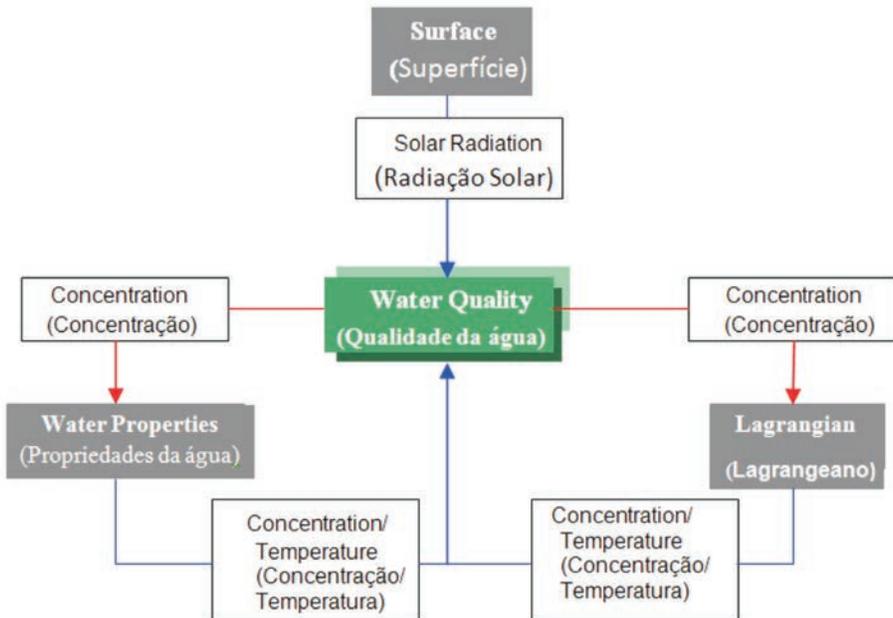


Figura 9-1: Fluxo de informação entre o Módulo Qualidade da Água e outros módulos

O Módulo Qualidade da Água foi desenvolvido através de termos fontes e sorvedouros. Tal abordagem é conveniente para conferir a esse módulo a flexibilidade necessária. Por conta da interdependência entre as propriedades envolvidas, um sistema de equações lineares é resolvido em cada volume de controle, de forma avançada ou recuada no tempo.

Muitas das equações descritas nas próximas seções foram escritas explicitando-se uma dependência em relação a alguns fatores, que contêm a resposta funcional de organismos a certos parâmetros, como luz, nutrientes e temperatura. Quando o crescimento é função de vários parâmetros, há uma ampla faixa de formas funcionais que podem expressar essa dependência. Para controlar essas diversas possibilidades, é comum se pensar em distintos parâmetros como fatores limitantes, que possam reduzir um teórico crescimento máximo, parâmetros esses que podem ser determinados separadamente e combinados em um número restrito de maneiras.

Cada fator limitante de crescimento pode assumir valores entre 0 e 1. O valor de 1 equivale a dizer que o fator não limita o crescimento (isto é, tem-se uma intensidade ótima, nutrientes estão disponíveis em excesso etc.) e o valor de 0 indica que o fator é tão severo que inibe completamente o crescimento.

Quatro principais abordagens têm sido utilizadas para se combinar fatores limitantes:

- Uma forma multiplicativa, na qual todos os fatores são multiplicados entre si. Essa abordagem assume que diversos nutrientes com estoque reduzido exercerão limitação mais severa do que ocorreria se um único nutriente fosse limitante. A principal crítica a essa abordagem é que a taxa de crescimento pode ser excessivamente baixa se diversos nutrientes são limitantes. Ainda, a severidade da limitação cresce com o número de nutrientes limitantes, tornando difícil a comparação entre modelos.
- A formulação que adota um mínimo, na qual o fator limitante mais severo assume sozinho o papel de limitante ao crescimento. Essa formulação é baseada na “Lei do Mínimo de Liebig”, que estabelece que o fator em menor disponibilidade irá controlar o crescimento de algas. A “formulação do mínimo” é muitas vezes utilizada para a limitação por nutrientes, apenas, adotando uma formulação multiplicativa para a luz enquanto fator limitante.
- A formulação que adota a média harmônica, que combina a influência recíproca de fatores limitantes da seguinte maneira:

$$f(\text{Light}, \text{Nutrient}_1, \text{Nutrient}_2, \dots, \text{Nutrient}_n) = \frac{n}{\frac{1}{f(\text{Light})} + \frac{1}{f(\text{Nutrient}_1)} + \dots + \frac{1}{f(\text{Nutrient}_n)}} \quad \text{Eq. 9-1}$$

onde n = número de fatores limitantes.

A formulação é baseada na analogia com um circuito eletrônico que disponha de um certo número de resistências em série. A base para tal formulação está no fato de que ela inclui algumas interações entre alguns nutrientes limitantes, não sendo, contudo, tão severa quanto a formulação multiplicativa. Para uma ampla faixa de condições, a formulação da média harmônica produz resultados similares aos

obtidos através da formulação do mínimo para curvas de crescimento (SWARTZMAN e BENTLEY, 1979 apud EPA, 1985).

- A formulação da média aritmética, que faz uso da média dos valores assumidos pelos fatores limitantes. A base para tal formulação é a mesma que justifica a formulação da média harmônica. Entretanto, tal abordagem raramente é utilizada, uma vez que não é capaz de restringir de forma satisfatória as taxas de crescimento. Por exemplo, tal abordagem permite que o crescimento ocorra mesmo em total ausência de nitrogênio, desde que qualquer outro nutriente esteja presente.

9.3 Fitoplâncton

O crescimento de fitoplâncton é limitado por diversos fatores, conforme descrito nas seções que seguem.

9.3.1 Limitação por nutrientes

O modelo aqui adotado considera nitrogênio (amônia e nitrato) e fósforo como nutrientes que limitam o crescimento do fitoplâncton. Nitrato e amônia são considerados pertencentes ao mesmo reservatório. No entanto, uma vez que dificuldades poderiam ser encontradas em se subtrair a incorporação de fitoplâncton dos reservatórios de amônia e nitrato, um fator de preferência por amônia é introduzido, designado por (β_{NH_4}). A limitação por nutrientes é expressa pela formulação de Michaelis-Menten, que adota a constante de meia saturação (K_N). No caso de amônia e nitrato, o modelo considera:

$$\Psi(N)_{Phy} = \frac{NH_4 + NO_3}{K_N + NH_4 + NO_3} \quad \text{Eq. 9-2}$$

onde $\Psi(N)_{Phy}$ representa a limitação de nutriente devido à presença de nitrogênio, NH_4 e NO_3 são as concentrações de amônia e nitrato (mg N.L.⁻¹) e K_n (mg N.L.⁻¹) é a constante de meia saturação, adotando-se o nitrogênio como fator limitante.

No caso do fósforo, a equação acima toma a forma:

$$\Psi(P)_{phy} = \frac{PO_4}{K_P + PO_4} \quad \text{Eq. 9-3}$$

onde $\Psi(P)_{phy}$ representa a limitação de nutriente devido ao fósforo, PO_4 é a concentração ($mg\ P.L^{-1}$) de fósforo (assumido como disponível apenas na forma de ortofosfato) e K_P é a constante de meia saturação para o fósforo ($mg\ P.L^{-1}$)

O fator limitante é dado pelo mínimo de $\Psi(N)_{phy}$ e $\Psi(P)_{phy}$.

9.3.2 Temperatura limitante

O conceito de Thornton e Lessen (1978) é aqui adotado para representar o fator limitante devido à temperatura $\Psi(T)$, tanto para organismos autótrofos como heterótrofos.

$$\Psi(T) = K_A(T) \cdot K_B(T) \quad \text{Eq. 9-4}$$

onde $K_A(T)$ é definido como:

$$K_A(T) = \frac{K_1 \cdot e^{\gamma_1 \cdot (T - T_{\min})}}{1 + K_1 \cdot (e^{\gamma_1 \cdot (T - T_{\min})} - 1)} \quad \text{Eq. 9-5}$$

com

$$\gamma_1 = \frac{Ln \frac{K_2(1 - K_1)}{K_1(1 - K_2)}}{T_{opt_{\min}} - T_{\min}} \quad \text{Eq. 9-6}$$

onde $K_B(T)$ é definido por:

$$K_B(T) = \frac{K_4 \cdot e^{\gamma_2 \cdot (T_{\max} - T)}}{1 + K_4 \cdot (e^{\gamma_2 \cdot (T_{\max} - T)} - 1)} \quad \text{Eq. 9-7}$$

com

$$\gamma_2 = \frac{\text{Ln} \frac{K_3(1 - K_4)}{K_4(1 - K_3)}}{T_{\max} - T_{\text{opt}_{\max}}} \quad \text{Eq. 9-8}$$

$T_{\text{opt}_{\min}}$ (°C) e $T_{\text{opt}_{\max}}$ (°C) representam o intervalo de temperatura para um processo ideal, enquanto que T_{\max} (°C) e T_{\min} (°C) representam o máximo e o mínimo toleráveis, a partir dos quais o processo é inteiramente inibido. As demais constantes (K_1 , K_2 , K_3 e K_4) controlam o formato da curva de resposta ao efeito da temperatura, sendo assumidas neste modelo como iguais para todos os organismos.

9.3.3 Luz limitante

A fotossíntese é possível apenas quando a intensidade da luz que chega às células das algas assume um valor mínimo. Isso significa que o fitoplâncton se restringe às camadas superiores da coluna d'água, onde a intensidade da luz é suficiente para garantir a realização de fotossíntese. A profundidade máxima de penetração da luz, e por consequência da própria produção primária, depende de um número de fatores: absorção da luz pela água, o comprimento de onda da luz, transparência da água, reflexão promovida pela superfície da água, reflexão promovida por sólidos em suspensão, latitude e estação do ano.

Já a radiação solar depende de fatores como a presença de nuvens e poeira, bem como da elevação solar. O cálculo da radiação solar é descrito no Módulo Superfície.

Quando a luz atinge a superfície da água, uma certa quantidade é refletida de volta, sendo que a intensidade dessa reflexão depende do ângulo de incidência da luz na superfície. Se esse ângulo é pequeno em referência ao plano horizontal, uma boa parte da luz incidente irá

refletir. Caso contrário, quanto mais próximo o ângulo estiver de 90° , maior será a penetração da luz na coluna d'água e menor a sua reflexão (NYBAKKEN, 1993). O ângulo no qual a luz incide sobre a superfície da água está diretamente relacionado à máxima altura do Sol em relação ao horizonte.

A extinção da luz em ambientes marinhos é um importante parâmetro de qualidade de água, muitas vezes avaliado por cientistas que lidam com o meio aquático e oceanógrafos. As características do campo de luz subaquático, por si só, é um campo clássico de pesquisa da Oceanografia Ótica (RIVERA, 1997). Ainda, a luz disponível é um dos mais importantes fatores limitantes no crescimento da flora submersa, ao lado de nutrientes e temperatura. Além disso, a disponibilidade luminosa é importante não só para determinar o crescimento máximo do vegetal, mas também para estabelecer quais espécies irão predominar no ambiente e quais irão evoluir (RIVERA, 1997). A atenuação vertical da luz e a distribuição espectral estão relacionadas à absorção promovida pela própria coluna d'água, bem como pelos organismos e material em suspensão/solução presentes na água. Dessa forma, a modelagem da atenuação da luz é a base para se prever a intensidade e o espectro luminoso disponível para populações fototrópicas (VILA et al., 1996).

9.3.3.1 Extinção da luz na água

Kirk (1980) define as propriedades óticas inerentes como os coeficientes de absorção, espalhamento e atenuação de um dado meio. O coeficiente de absorção é definido como a fração absorvida por unidade de comprimento percorrido por um feixe paralelo e monocromático de luz, que incida sobre uma camada infinitesimalmente fina do meio considerado. De forma similar, o coeficiente de espalhamento é a fração espalhada do feixe incidente por unidade de comprimento percorrido. O coeficiente de atenuação é definido como a soma dos coeficientes de absorção e espalhamento.

Por definição, o campo de incidência de luz ou a irradiância no sentido superfície-fundo em uma dada coluna d'água, se refere ao valor instantâneo do fluxo radiante no sentido fundo-superfície em uma unidade horizontal de área.

Kirk (1980) diferencia entre irradiância para baixo e irradiância para cima, respectivamente, de luz no sentido fundo e no sentido superfície da coluna d'água. No estudo de extinção de luz, a quantidade buscada normalmente é a PAR (radiação fotossinteticamente ativa, em português) no sentido superfície-fundo, que se refere à irradiância na faixa de 400 – 700 nm do espectro de onda. Essa irradiância é atenuada tanto por espalhamento quanto por absorção, promovidos pelos constituintes presentes na coluna d'água. Os principais constituintes presentes na coluna d'água, responsáveis por esses dois processos, incluem substâncias orgânicas dissolvidas, plâncton vivo ou morto, partículas inorgânicas em suspensão, e a água propriamente dita. Esses componentes se diferenciam na forma em que absorvem ou promovem o espalhamento da irradiância na faixa fotossintética do comprimento de luz.

Geralmente, a forte absorção em regiões continentais e estuarinas é atribuída a substâncias orgânicas dissolvidas e em suspensão e/ou fitoplâncton. Por outro lado, o espalhamento, como apontado por Kirk (1980), por si só não “remove” luz, uma vez que o fóton espalhado permanece disponível para a fotossíntese. Entretanto, pelo fato de induzir os fótons a um movimento em zigue-zague, faz com que a probabilidade de eles serem absorvidos pelos constituintes do meio aquático aumente. Dessa forma, por exemplo, a atenuação vertical decorrente do espalhamento por partículas em suspensão pode ser intensificada.

Um método usual, muitas vezes empregado na modelagem da extinção da irradiância no sentido fundo, é considerar a influência dos principais constituintes opticamente ativos de forma separada, atribuindo uma extinção parcial para cada um deles. A soma de todas as extinções parciais fornece o valor médio do coeficiente de extinção na coluna d'água (RIVERA, 1997).

A extinção da luz em águas naturais é afetada por quatro grupos primários de substâncias, cuja composição e concentração diferem para o corpo d'água considerado, gerando, por consequência, diferentes valores de coeficiente de extinção. Ainda, o coeficiente de extinção pode mudar com o tempo, devido à variação na composição e concentração desses fatores primários. Esses fatores, que estão relacionados aos constituintes da água que são opticamente ativos, incluem material inorgânico em

suspensão, fitoplâncton vivo ou morto, substâncias orgânicas em suspensão e a água propriamente dita (RIVERA, 1997). Parson et al. (1984) fazem uso desse conceito na definição dos coeficientes de extinção na coluna d'água (k), conforme:

$$k = k_w + k_p + k_d + k_s \quad \text{Eq. 9-9}$$

onde k_w , k_p , k_d , and k_s representam difusão e espalhamento da energia luminosa devido a, respectivamente, água (w), fitoplâncton (p), partículas em suspensão que não o fitoplâncton (d) e material dissolvido (s). As partículas em suspensão incluem vários constituintes, como partículas de argila, detritos orgânicos, e organismos de diferentes tamanhos. Cada um desses coeficientes de extinção é fortemente dependente do comprimento de onda incidente, no entanto, de acordo com Parson et al. (1984), para fins de avaliação de processos biológicos, a adoção do coeficiente médio de extinção para o comprimento de onda correspondente à PAR é provavelmente mais prático do que o uso de comprimentos de onda específicos.

Os coeficientes de extinção parcial podem ser determinados a partir dos coeficientes específicos e da concentração dos constituintes opticamente ativos presentes na coluna d'água, através da relação:

$$k_n = \kappa_n c_n \quad \text{Eq. 9-10}$$

onde k_n é o coeficiente de extinção de um dado constituinte n , κ_n é a extinção específica para esse constituinte e c_n a sua concentração observada. A maior parte dos modelos de qualidade de água (por exemplo, VILA e GARCIA-GIL, 1996; ARHONDITSIS et al., 2000; NAPOLITANO et al., 2000; NAKATA et al., 2000; KAWAMIYA et al., 2000; HUMBORG et al., 2000; NEUMAN, 2000; TETT e WILSON, 2000) computam o coeficiente de extinção considerando somente o efeito do fitoplâncton. A forma geral dessa relação usualmente obedece à equação mostrada a seguir, com os diferentes conjuntos de parâmetros determinados de acordo com medições locais.

$$k = k_w + \kappa_{phy} C_{phy} \quad \text{Eq. 9-11}$$

Cole e Buchak (1995), e Somlyódy e Koncsos (1991) são alguns exemplos de estudos nos quais o coeficiente de extinção é computado considerando-se não apenas a concentração de fitoplâncton, mas também de sedimento em suspensão. Cada um desses valores específicos de extinção pode representar um problema em termos de modelagem. Uma solução alternativa usualmente empregada é desenvolver uma relação baseada em medições locais, o que permitiria obter-se um coeficiente de extinção geral. Esse tipo de relação pode ser dependente de um dos fatores já descritos (usualmente o fitoplâncton), mas não será capaz de distinguir entre o constituinte escolhido e os demais. Parson et al. (1984) apresentam uma equação desse tipo, derivada de observações conduzidas na porção oeste do Atlântico Norte, equação essa que já foi utilizada por diversos autores (YANAGI et al., 1997; MIRANDA, 1997). Essa equação relaciona o coeficiente médio de extinção (k) com a concentração de clorofila a (C) em comunidades naturais de fitoplâncton, conforme:

$$k = 0.04 + 0.0088C + 0.054C^{2/3} \quad \text{Eq. 9-12}$$

Os coeficientes utilizados para computar o parâmetro de extinção são determinados pelas condições de iluminação que prevaleçam na área de estudo. Portela (1996), seguindo observações feitas por Martins e Duffner (1982) feitas no estuário do Tagus, obteve um valor médio para o coeficiente de extinção de 4.5 m^{-1} e uma mediana de 3.4 m^{-1} , valores obtidos através da aplicação de regressão linear nos dados observados de coeficiente de extinção e sedimento em suspensão medidos no estuário (MARTINS e DUFFNER, 1982). Como esperado, uma relação bem próxima entre essas duas variáveis foi obtida. A equação final gerada pela regressão linear foi:

$$k = 1.24 + 0.036C_{ss} \quad \text{Eq. 9-13}$$

Uma outra formulação incluída no Módulo Qualidade de Água do MOHID, que calcula o efeito da atenuação da luz através da dependência

em relação à concentração de fitoplâncton e sedimento em suspensão, foi apresentada por Pina (2001):

$$k = 0.04 + 0.0088C + 0.054C^{2/3} + 0.036C_{ss} \quad \text{Eq. 9-14}$$

9.3.3.2 Reação do fitoplâncton à incidência de luz

A taxa de reação fotossintética é estritamente dependente da intensidade luminosa. O aumento da luminosidade acarreta taxas maiores até que um máximo seja atingido. Nesse ponto os produtores primários são incapazes de fazer uso da luz adicional, uma vez que as enzimas envolvidas na atividade fotossintética não podem reagir de forma suficientemente rápida para processar os raios luminosos que incidem em excesso, de forma que a taxa de fotossíntese atinge uma assíntota. De fato, a partir daí, intensidades maiores de luz inibem a fotossíntese (VALIELA, 1995).

Durante as últimas décadas, uma quantidade considerável de pesquisa foi conduzida no campo da modelagem de produtividade primária (por exemplo, STEELE; 1962; JASSBY e PLATT, 1976; PLATT et al., 1980; FALKOWSKI & WIRICK, 1981; EILERS e PEETERS, 1988). Na maior parte desses trabalhos, formulações que relacionavam produtividade primária e intensidade luminosa foram propostas e testadas com dados de campo e/ou de laboratório. A maior parte das equações assim estabelecidas é empírica, sendo que somente poucas foram deduzidas de fato da fisiologia da fotossíntese (por exemplo, FASHAM e PLATT, 1983; EILERS e PEETERS, 1988). Essas formulações têm sido utilizadas por diversos anos em modelos ecológicos. Nelas a intensidade luminosa afeta somente a fotossíntese, sendo que sua representação faz uso da formulação de Steele (1962) integrada na profundidade. Parsons et al. (1995) fazem uso desse modelo de dimensão zero e da clássica função de Beer-Lambert para a intensidade luminosa:

$$E(z) = E_0 \cdot e^{(-k(p)z)} \quad \text{Eq. 9-15}$$

com

$$\Psi(E) = \frac{e^1}{k(p).z} \cdot \left(e^{\frac{E_0}{E_{opt}} e^{(-k(p)z)}} - e^{\frac{E_0}{E_{opt}}} \right) \quad \text{Eq. 9-16}$$

onde E_0 representa a radiação solar efetiva sobre a superfície da água ($W.m^{-2}$), $k(p)$ o fator de extinção da luz (m^{-1}), E_{opt} a intensidade de luz ideal para fotossíntese e z a profundidade (m).

9.3.4 Equações

A Figura 9-2 representa o fluxo interno de fitoplâncton modelado pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

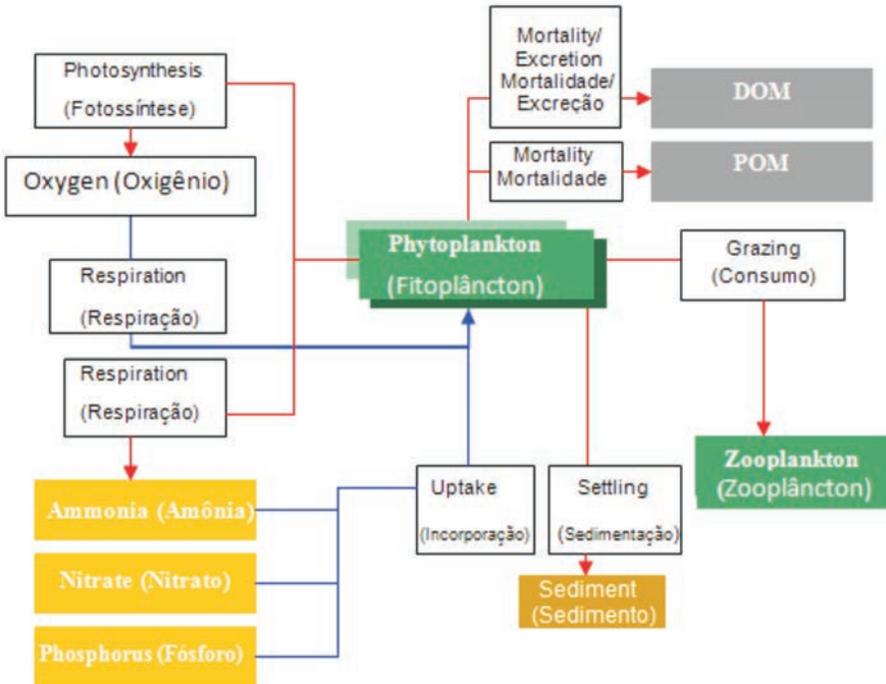


Figura 9-2: Fluxo interno de fitoplâncton

O fitoplâncton é descrito em termos de concentração de carbono ($mg.C.L^{-1}$). O modelo assume três fatores limitantes que possam afetar a sua taxa de crescimento máxima, μ_{max} : Temperatura, $\Psi(T)$, disponibilidade de luz, $\Psi(E)$, e concentração de nutrientes, conforme descrito em capítulo anterior.

Asimulação do comportamento do fitoplâncton é construída obedecendo às seguintes considerações: esses organismos consomem nutriente inorgânico (amônia e nitrato do ciclo de nitrogênio e fósforo inorgânico

do ciclo do fósforo) dependendo de sua disponibilidade. Outro fator que influencia o crescimento do fitoplâncton é a disponibilidade de luz como fonte de energia para a fotossíntese. Durante esse processo, oxigênio dissolvido é produzido. Já a respiração consome oxigênio e produz amônia. Por outro lado, a excreção do fitoplâncton produz material orgânico dissolvido (nitrogênio e fósforo orgânico dissolvido, tanto refratário quanto não refratário). Como decorrência de sua mortalidade, o fitoplâncton aumenta a quantidade de material orgânico dissolvido e particulado (nitrogênio e fósforo) no meio. Ainda, a concentração de fitoplâncton decresce em consequência de seu consumo pelo zooplâncton. Por último, o processo de decantação do fitoplâncton é modelado no Módulo Propriedades da Água.

A equação que formula a taxa de crescimento do fitoplâncton utilizada no MOHID pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \Phi_{Phy}}{\partial t} = (\mu_{Phy} - r_{Phy} - ex_{Phy} - m_{Phy}) \Phi_{Phy} - G \quad \text{Eq. 9-17}$$

A taxa de crescimento, μ_{Phy} (dia^{-1}), é dada por:

$$\mu_{Phy} = \mu_{\max} \cdot \min(\Psi(N)_{Phy}, \Psi(P)_{Phy}) \cdot \Psi(E)_{Phy} \cdot \Psi(T)_{Phy} \quad \text{Eq. 9-18}$$

onde μ_{\max} representa a máxima taxa de crescimento.

A respiração, r_{Phy} (dia^{-1}), é dada por:

$$r_{Phy} = k_{er} \cdot \exp(0.069 \cdot T^{\circ}) + k_p \mu_{Phy} \quad \text{Eq. 9-19}$$

onde k_{er} representa a constante endógena de respiração e k_p o fator de fotorrespiração.

A excreção, ex_{Phy} (dia^{-1}), é dada por:

$$ex_{Phy} = \varepsilon_{Phy} \cdot \mu_{Phy} (1 - \Psi(E)_{Phy}) \quad \text{Eq. 9-20}$$

A mortalidade natural, m_{Phy} (dia^{-1}), é dada por:

$$m_{phy} = m_{max} \cdot \frac{\frac{\Phi_{phy}}{\mu_{phy}}}{Km + \frac{\Phi_{phy}}{\mu_{phy}}} \quad \text{Eq. 9-21}$$

onde m_{max} (dia^{-1}) representa a máxima mortalidade e K_m (dia^{-1}) a constante de meia saturação de mortalidade.

O consumo de fitoplâncton pelo zooplâncton, G ($\text{mgC.l}^{-1}.\text{dia}^{-1}$), é dado por:

$$G = \frac{g_z}{E} \Phi_z \quad \text{Eq. 9-22}$$

onde g_z ($\text{mgC.l}^{-1}.\text{dia}^{-1}$) representa a taxa de crescimento líquido de zooplâncton, E (mgC.l^{-1}) é a eficiência de assimilação e Φ_z é a concentração de zooplâncton (mgC.l^{-1}).

9.4 Zooplâncton

O zooplâncton é também descrito em termos de concentração de carbono (mgC.l^{-1}), sendo que a taxa de crescimento líquido, g_z (dia^{-1}) representa a constante de I_{lev} (1945), adaptada por Parsons et al. (1967). Respiração e mortalidade natural do zooplâncton (dia^{-1}), respectivamente r_z e m_{zo} , são consideradas funções da temperatura, sendo tratadas como variáveis à parte. A mortalidade devida à predação, G_z , depende da concentração de zooplâncton.

A Figura 9-3 representa os fluxos internos de zooplâncton.

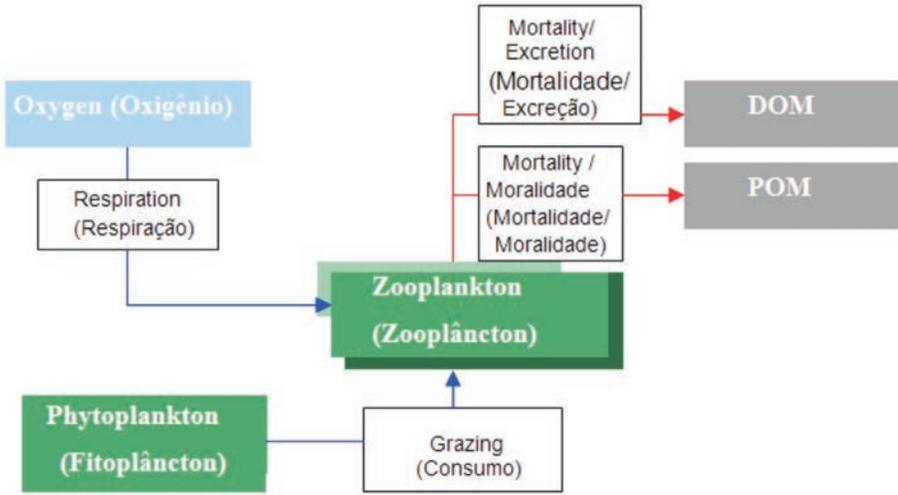


Figura 9-3: Fluxo interno de zooplâncton

9.4.1 Equações

O crescimento de zooplâncton é dado por:

$$\frac{\partial \Phi_Z}{\partial t} = (g_z - r_z - m_z) \cdot \Phi_Z \cdot G_Z \quad \text{Eq. 9-23}$$

A taxa de crescimento, g_z (day⁻¹), é dada por:

$$g_z = g_{\max} \cdot (T_{ref}) \cdot \Psi(T)_Z \cdot \left(1 - e^{-\Lambda(\Phi_{phy} - \Phi_{phy0})}\right) \quad \text{Eq. 9-24}$$

onde g_{\max} representa a taxa máxima de crescimento, Λ representa a constante de Ivlev e Φ_{phy0} a concentração mínima de fitoplâncton para que seu consumo pelo zooplâncton ocorra. A limitação imposta pela temperatura é calculada da mesma forma adotada na modelagem do fitoplâncton, porém, com outras constantes.

A mortalidade natural e a respiração, $r_z + m_z$ (dia⁻¹), são dadas por:

$$r_z + m_z = d_z \cdot (T_{ref}) \cdot \Psi(T) \quad \text{Eq. 9-25}$$

onde d_z representa a mortalidade natural e taxa de respiração.

O consumo de zooplâncton, G_z (dia^{-1}), devido à predação é dado por:

$$G_z = e_z Z \quad \text{Eq. 9-26}$$

onde e_z representa a taxa de mortalidade por predação.

9.5 Nitrogênio

No Módulo Qualidade de Água do MOHID, o nitrogênio pode aparecer tanto na forma orgânica quanto inorgânica. Nitrogênio inorgânico é dividido em amônia (NH_4), nitrito (NO_2) e nitrato (NO_3). Já o nitrogênio orgânico é dividido na forma particulada (PON, em inglês) e dissolvida, essa fase subdividida em não refratária (DONnr, em inglês) e refratária (DONre). DONnr inclui pequenos substratos moleculares, assumidos como degradados já no próprio dia em que são produzidos, e DONre aqueles com tempos de degradação superiores.

9.5.1 Amônia

As fontes de amônia são as formas orgânicas de nitrogênio (PON, DONnr e DONre) produzidas do decaimento de fitoplâncton e como subproduto da respiração em ausência de luz. Os sorvedouros de amônia são o nitrito (nitrificação) e a incorporação pelo fitoplâncton.

A Figura 9-4 representa os fluxos internos de amônia modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

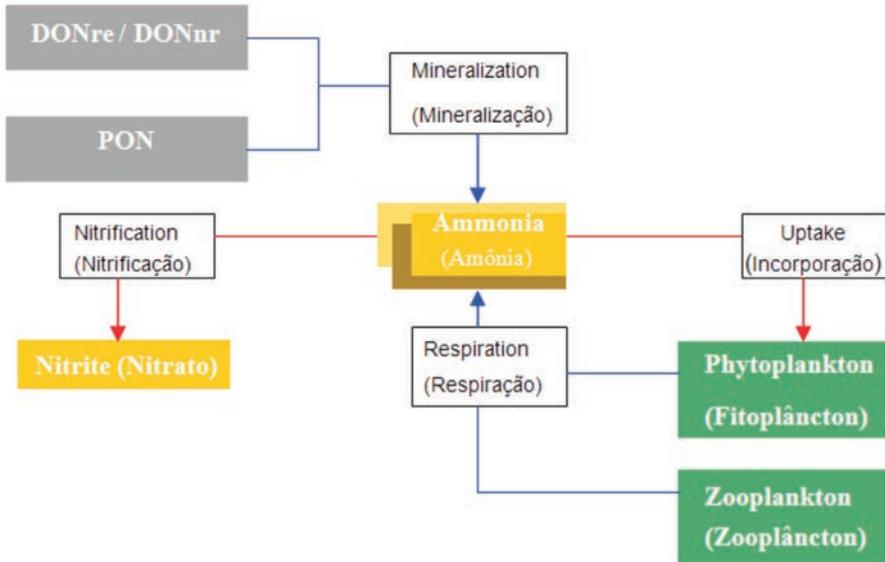


Figura 9-4: Fluxo interno de amônia

A equação que representa a produção/consumo de amônia é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{NH_4}}{\partial t} = (f_{in/Phy} e^{X_{Phy}} - \mu_{NH_4}) \Phi_{Phy} + f_{in/Z} e^{X_Z} \Phi_Z + \varphi_{Nre} \Phi_{DONre} + \varphi_{Nnr} \Phi_{DONnr} + f_{orgP/Phy} \varphi_{det} \Phi_{PON} \quad \text{Eq. 9-27}$$

A taxa de assimilação de amônia, μ_{NH_4} , é dada por

$$\mu_{NH_4} = \beta_{NH_4} \alpha_{N:C} \mu_{Phy} \quad \text{Eq. 9-28}$$

onde β_{NH_4} é o fator de preferência de amônia, dado por:

$$\beta_{NH_4} = \frac{\Phi_{NH_4} \cdot \Phi_{NO_3}}{(K_N + \Phi_{NH_4})(K_N + \Phi_{NO_3})} \cdot \frac{\Phi_{NH_4} \cdot K_N}{(K_N + \Phi_{NH_4})(K_N + \Phi_{NO_3})} \quad \text{Eq. 9-29}$$

e $\alpha_{N:C}$ representa a razão de Redfield entre nitrogênio e carbono, N:C.

A taxa de mineralização de DONre, φ_{Nre} é dada por:

$$\varphi_{Nre} = M_{DONre} \theta_{DONre} (T - T_{ref}) \frac{\Phi_{Phy}}{K_{PhyNutRege} + \Phi_{Phy}} \quad \text{Eq. 9-30}$$

onde

M_{DONre} – taxa de referência para a mineralização de DONre;

θ_{DONre} – coeficiente de temperatura para a mineralização de DONre;

T_{ref} – temperatura de referência;

$K_{PhyNutRege}$ – constante de meia saturação para a regeneração de fitoplâncton.

A taxa de mineralização de DONnr, φ_{Nnr} é dada por:

$$\varphi_{Nnr} = M_{DONnr} \theta_{DONnr} (T - T_{ref}) \quad \text{Eq. 9-31}$$

onde

M_{DONnr} – taxa de referência para a mineralização de DONnr;

θ_{DONnr} – coeficiente de temperatura para a mineralização de DONnr.

A taxa de dissolução de PON, φ_{det} é dada por:

$$\varphi_{det} = M_{det} \theta_{det} (T - T_{ref}) \quad \text{Eq. 9-32}$$

onde

M_{det} – taxa de referência para a dissolução de PON;

θ_{det} – coeficiente de temperatura para a dissolução de PON.

9.5.2 Nitrito

A fonte de nitrito, modelada no MOHID, é a amônia, enquanto o sorvedouro é o nitrato. A Figura 9-5 representa os fluxos internos de nitrito modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

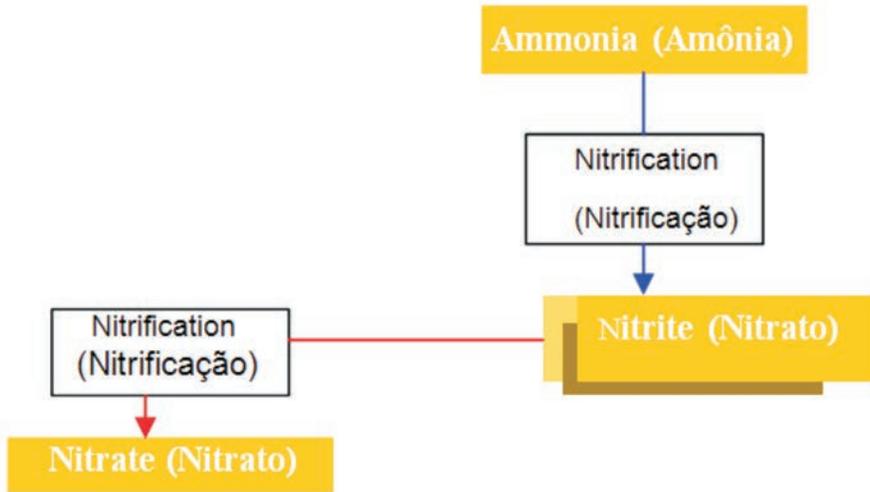


Figure 9-5: Fluxo interno de nitrito

A equação que representa a produção/consumo de nitrito é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{NO_2}}{\partial t} = \varphi_{2N} \Phi_{NH_4} - \varphi_{2N} \phi_{NO_2} \quad \text{Eq. 9-33}$$

com a taxa de nitrificação, φ_{2N} , dada por:

$$\varphi_{2N} = M_{nit} \theta_{nit} (T - T_{ref}) \frac{\Phi_{O_2}}{K_{nit} + \Phi_{O_2}} \quad \text{Eq. 9-34}$$

onde

M_{nit} – taxa de referência para a nitrificação;

θ_{nit} – coeficiente de temperatura para a nitrificação;

K_{nit} – constante de meia saturação para a nitrificação.

9.5.3 Nitrato

A fonte de nitrato, modelada pelo MOHID, é o nitrito e o sorvedouro é a incorporação pelo fitoplâncton.

A Figura 9-6 representa os fluxos internos de nitrato modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

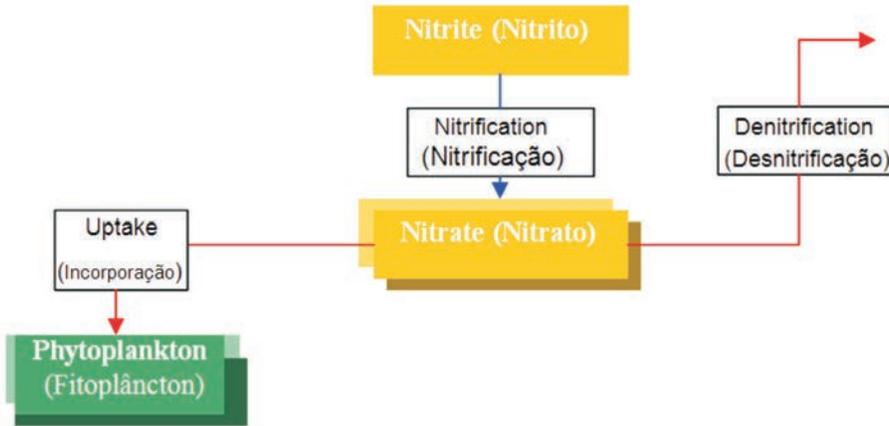


Figure 9-6: Fluxo interno de nitrato

A equação que representa a produção/consumo de nitrato é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{NO_3}}{\partial t} = \varphi_{2N} \Phi_{NO_2} - \varphi_{2N} \phi_{NO_3} - \mu_{NO_3} \quad \text{Eq. 9-35}$$

A taxa de assimilação de NO_3 , μ_{NO_3} , é dada por:

$$\mu_{NO_3} = (1 - \beta_{NH_4}) \alpha_{N:C} \mu_{Phy} \quad \text{Eq. 9-36}$$

9.5.4 Nitrogênio orgânico particulado (PON, em inglês)

As fontes de PON são as mortalidades de fitoplâncton e zooplâncton, enquanto que os sorvedouros são a sua mineralização à amônia e decomposição a DONre.

A Figura 9-7 representa os fluxos internos de PON modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

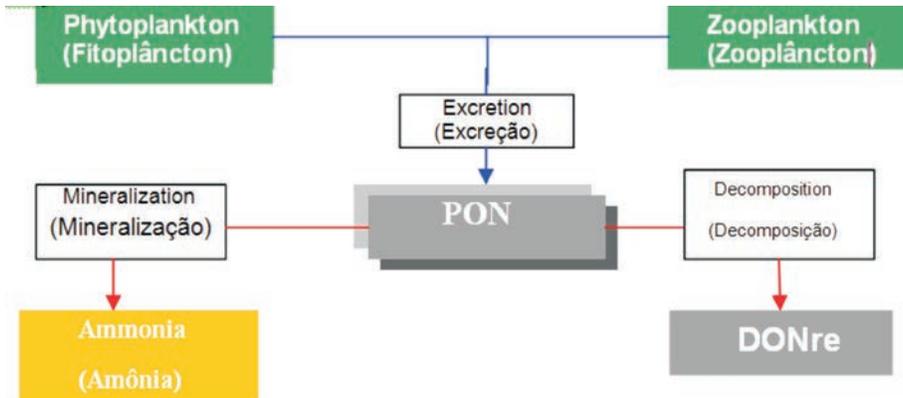


Figure 9-7: Fluxo interno de PON

A equação que representa a produção/consumo de PON é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{PON}}{\partial t} = \left[(1 - f_{orgD/Phy}) (1 - f_{in/Phy}) ex_{Phy} + m_{Phy} \right] \Phi_{Phy} + \left[(1 - f_{orgD/Z}) (1 - f_{in/Z}) ex_Z + m_Z \right] \Phi_Z - \varphi_{det} \Phi_{PON} \quad \text{Eq. 9-37}$$

Todas as variáveis têm o mesmo significado apresentado nos parágrafos precedentes.

9.5.5 Nitrogênio orgânico dissolvido não refratário (DONnr, em inglês)

As fontes de DONnr são a mortalidade e a excreção de fitoplâncton e zooplâncton, enquanto os sorvedouros são a mineralização à amônia.

A Figura 9-8 representa os fluxos internos de DONnr modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

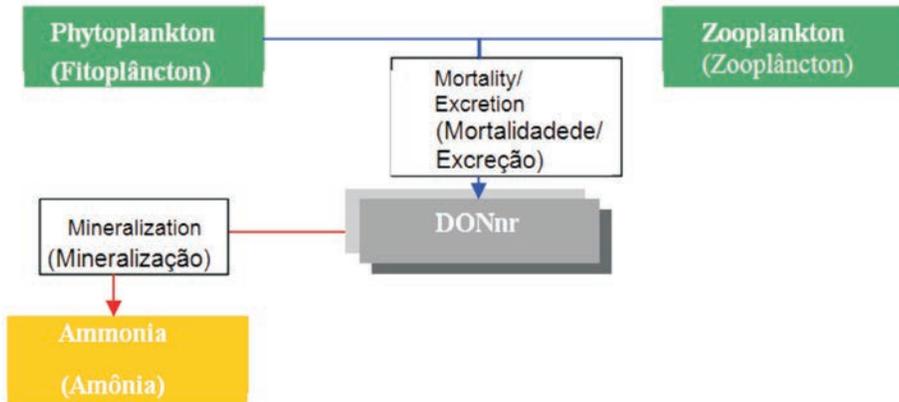


Figura 9-8: Fluxo interno de DONnr modelado no MOHID

A equação que representa a produção/consumo de DONnr é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{DONnr}}{\partial t} = f_{orgD/Phy} (1 - f_{in/Phy}) ex_{Phy} \Phi_{Phy} + f_{orgD/Z} (1 - f_{in/Z}) ex_Z \Phi_Z - \varphi_{Nnr} \Phi_{DONnr} \quad \text{Eq. 9-38}$$

Todas as variáveis têm o mesmo significado apresentado nos parágrafos precedentes.

9.5.6 Nitrogênio orgânico dissolvido refratário (DONre, em inglês)

A fonte de DONre é a decomposição de PON e o sorvedouro a mineralização à amônia.

A Figura 9-9 representa os fluxos internos de DONre modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

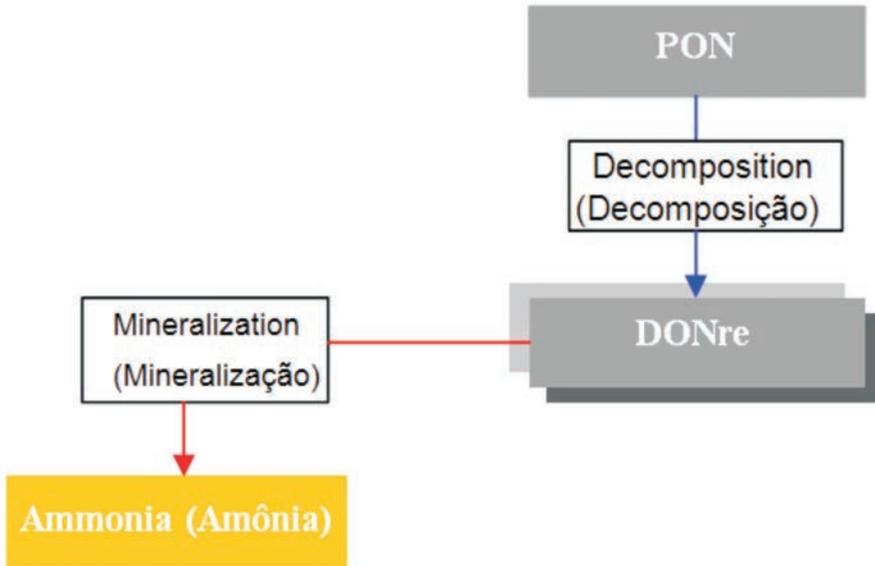


Figura 9-9: Fluxo interno de DONre modelado no MOHID

A equação que representa a produção/consumo de DONre é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{DONre}}{\partial t} = \varphi_{det} \Phi_{PON} (1 - f_{orgP/Phy}) - \varphi_{Nr} \Phi_{DONre} \quad \text{Eq. 9-39}$$

Todas as variáveis têm o mesmo significado apresentado nos parágrafos precedentes.

9.6 Fósforo

Assim como ocorre com o nitrogênio, no MOHID o fósforo aparece tanto na forma orgânica quanto na inorgânica. O fósforo inorgânico é assumido estar disponível como ortofosfato (PO_4) para incorporação pelo fitoplâncton. Já o fósforo orgânico é dividido na forma particulada (POP, em inglês) e dissolvida, essa fase sendo ainda subdividida em não refratária (DOPnr) e refratária (DOPre).

A equação que representa a produção/consumo de fósforo é implementada da mesma forma adotada para o ciclo do nitrogênio, com exceção de que há somente um compartimento destacado para a sua forma inorgânica.

9.6.1 Fósforo inorgânico

A Figura 9-10 representa os fluxos internos de fósforo modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

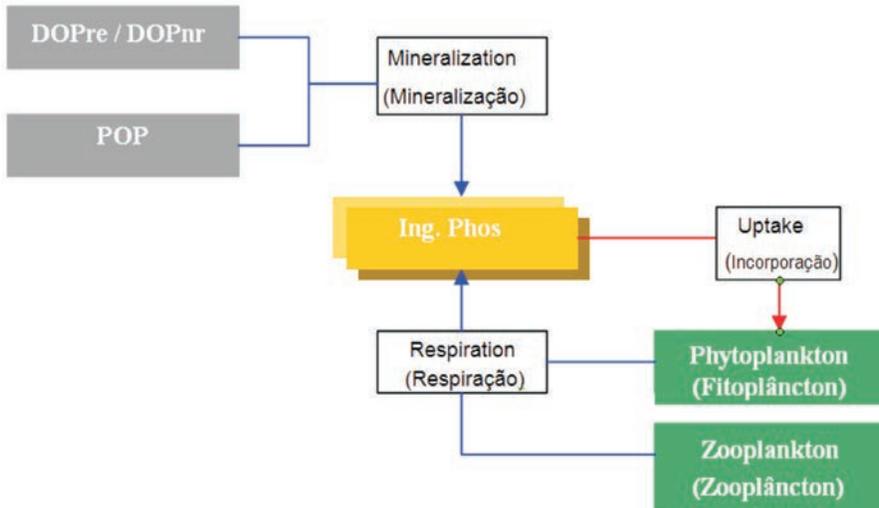


Figura 9-10: Fluxo interno de fósforo inorgânico

A equação que representa a produção/consumo de fósforo é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{PO4}}{\partial t} = (f_{in/phy} ex_{phy} - \mu_{PO4}) \Phi_{phy} + f_{in/z} ex_z \Phi_z + \varphi_{Pre} \Phi_{DOPre} + \varphi_{Pnr} \Phi_{DOPnr} + f_{orgP/phy} \varphi_{det} \Phi_{POP}$$

Eq. 9-40

A taxa de assimilação de PO_4 , μ_{PO4} , é dada por:

$$\mu_{PO4} = \alpha_{N:P} \mu_{phy}$$

Eq. 9-41

onde $\alpha_{N:P}$ representa a razão de Redfield entre nitrogênio e fósforo, N:P.

9.6.2 Fósforo orgânico particulado (POP, em inglês)

As fontes de POP são as mortalidades de fitoplâncton e zooplâncton, enquanto que os sorvedouros são a sua decomposição a DOPre.

9.6.3 Fósforo orgânico dissolvido não refratário (DOPnr, em inglês)

As fontes de DOPnr são a mortalidade e a excreção de fitoplâncton e zooplâncton, enquanto que os sorvedouros são a mineralização a ortofosfato (PO_4).

9.6.4 Fósforo orgânico dissolvido refratário (DOPre, em inglês)

A fonte de DOPre é a decomposição de POP e o sorvedouro a mineralização a ortofosfato (PO_4).

9.7 Oxigênio

A Figura 9-11 representa os fluxos internos de oxigênio modelados pelo Módulo Qualidade de Água do MOHID.

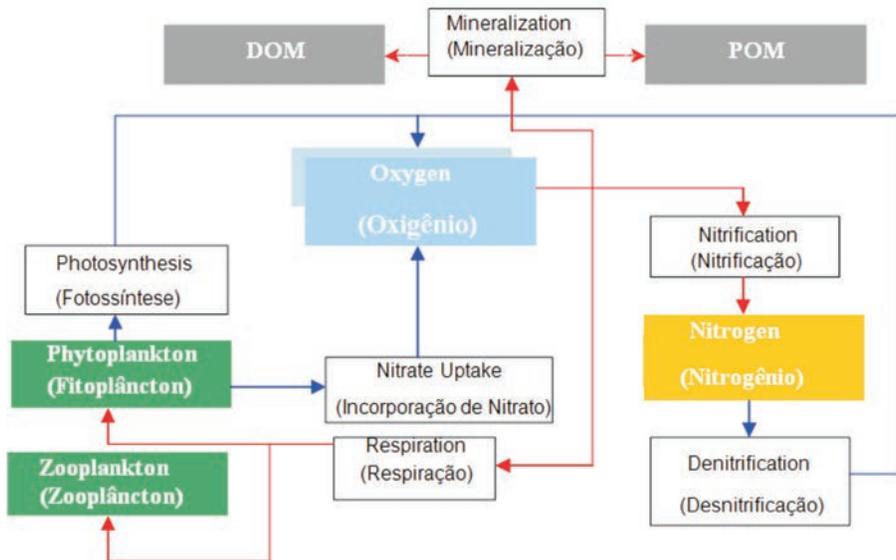


Figura 9-11: Fluxo interno de oxigênio inorgânico

A equação que representa a produção/consumo de oxigênio é dada por:

$$\frac{\partial \Phi_O}{\partial t} = (\mu_{phy} \alpha_{O,C} + \mu_{phy} \alpha_{O,N} \alpha_{N,C} (1 - \beta_{NH_4}) - \alpha_{O,C} r_{phy}) \Phi_{Phy} + r_z \alpha_{O,C} \Phi_{Zoo} + \varphi_2 \alpha_{N,O} \Phi_{NH_4} - \left(\alpha_{MinO:N} \varphi_{Nre} \Phi_{DONre} + \alpha_{MinO:N} \varphi_{Nnr} \Phi_{DONnr} + \alpha_{MinO:N} \varphi_{det} \Phi_{PON} + \alpha_{MinO:P} \varphi_{Pre} \Phi_{DOPre} + \alpha_{MinO:P} \varphi_{Pnr} \Phi_{DOPnr} + \alpha_{MinO:P} \varphi_{det} \Phi_{POP} \right) \Phi_O \quad \text{Eq. 9-42}$$

onde

$\alpha_{MinO:N}$ – é a razão que expressa o consumo de oxigênio decorrente da mineralização de nitrogênio;

$\alpha_{MinO:P}$ – é a razão que expressa o consumo de oxigênio decorrente da mineralização de fósforo.

10.2 Vento

A tensão do vento é calculada de acordo com a lei quadrática da fricção, dada por

$$\vec{\tau}_w = C_D \rho_a \vec{W} \left| \vec{W} \right| \quad \text{Eq. 10-1}$$

onde CD é o coeficiente de atrito, que é função da velocidade do vento, ρ_a é a densidade do ar e W é a velocidade do vento a uma altura de 10 m acima da superfície da água.

O coeficiente de atrito é computado de acordo com Large e Pond (1981):

$$C_D = 1.14e^{-3} \quad (W < 10 \text{m/s}) \quad \text{Eq. 10-2}$$

$$C_D = 4.4e^{-4} + 6.5e^{-5} \vec{W} \left| \vec{W} \right| \quad (10 \text{m/s} < W < 26 \text{m/s}) \quad \text{Eq. 10-3}$$

10.3 Fluxos de calor

O fluxo de calor na superfície da água pode ser separado em cinco tipos distintos: radiação solar de comprimento curto de onda, radiação atmosférica de comprimento longo de onda, radiação da água de comprimento longo de onda, calor sensível e calor latente. Esses fluxos podem ser agrupados de duas formas: (i) fluxo radiativo, que reúne os três primeiros tipos; (ii) fluxo não radiativo, que reúne os dois restantes; ou (iii) fluxos que independem da temperatura da água, reunindo os dois primeiros tipos; (iv) fluxos que dependem da temperatura da água, reunindo os três últimos tipos.

10.3.1 Radiação solar

A radiação solar é um importante parâmetro ecológico, e muitas vezes uma forçante que assume papel-chave em processos ecológicos (BROCK,

1981). O fluxo de radiação solar de comprimento curto de ondas é computado no MOHID por:

$$Q = Q_0 A_t (1 - 0.65 C_n^2) (1 - R_s) \quad \text{Eq. 10-4}$$

onde Q_0 é o fluxo de radiação solar no topo da atmosfera (W.m^{-2}), A_t é o coeficiente de transmissão atmosférica, C_n é o percentual de área do céu coberta por nuvens e R_s representa o albedo (valor de 0.055). O fluxo de radiação solar no topo da atmosfera pode ser expresso por:

$$Q_0 = \frac{I_0}{r^2} \text{senz} \quad \text{Eq. 10-5}$$

onde I_0 representa a constante solar que expressa a energia recebida a uma distância média do Sol, na região externa à atmosfera, r é o vetor radial e z é a altura do Sol. Adota-se muitas vezes um valor padrão de 1.353 W.m^{-2} (BROCK, 1981).

10.3.1.1 Vetor radial, r

Durante a sua revolução em torno do Sol, a distância da Terra em relação ao astro varia ao longo do ano em até 3.0 %, devido à excentricidade de sua órbita. Essa excentricidade influencia em menor medida a quantidade de radiação solar que chega à superfície terrestre. O vetor radial da Terra, r , expressa explicitamente essa variação, podendo ser calculado de forma aproximada através da seguinte equação (NICHOLLS e CHILD, 1979 apud BROCK, 1981):

$$r = 1.0 + 0.017 \cos \left[2\pi \frac{(186 - d)}{365} \right] \quad \text{Eq. 10-6}$$

onde d representa o dia juliano.

10.3.1.2 Altura solar

A radiação solar em qualquer localidade da Terra é influenciada pelo movimento de rotação do planeta em torno do Sol. A Terra é deslocada

em 23,45° em relação à perpendicular ao plano de sua órbita, e a esse deslocamento dá-se o nome de declinação terrestre. Essa declinação também expressa a distância angular entre o Sol e o equador, medida ao meio-dia, sendo positiva no sentido norte. Ela depende unicamente do dia do ano que se esteja considerando, possuindo comportamento oposto nos hemisférios Sul e Norte, podendo ser obtida de forma precisa a partir de tabelas astronômicas. Para fins práticos, ela alternativamente pode ser calculada com boa precisão através da equação dada por Cooper (1969 apud BROCK, 1981):

$$D1(\text{declination}) = 23.45 \sin [2\pi(284 + d)/365] \quad \text{Eq. 10-7}$$

O outro grande movimento que pode influenciar o nível de radiação solar que chega a uma dada superfície da Terra é a rotação que o planeta realiza diariamente em torno de seu próprio eixo. A Terra se move a cerca de 15° por hora e o ângulo do pôr do sol (ou do seu nascer), W1, pode ser calculado se a latitude (L) e declinação são conhecidas:

$$W1 = \arccos (-\tan(L)\tan(D1)) \quad \text{Eq. 10-8}$$

Nessa equação, se L e D1 estiverem em graus, então W1 também estará em graus. A partir do valor de W1, o comprimento do dia em horas, L1, pode ser calculado a partir das equações:

$$\text{Sunrise} = 12 - \frac{1}{2} L1 \quad \text{Eq. 10-9}$$

$$\text{Sunset} = 12 + \frac{1}{2} L1 \quad \text{Eq. 10-10}$$

O ângulo-hora a qualquer tempo pode ser calculado a partir das equações:

$$W2 = (T+12)*\pi/12, T < 12 \quad \text{Eq. 10-11}$$

$$W2 = (T-12)*\pi/12, T > 12$$

onde T é o tempo (h) decorrido da meia-noite. O ângulo do Zênite, ou a elevação do Sol acima do horizonte, Z, pode ser calculado se a declinação, D1, latitude, L1, ângulo-hora e W2 são conhecidos, através da equação:

$$\text{Cos}(Z) = \sin(D1)\sin(L) + \cos(D1)\cos(L)\cos(W2) \quad \text{Eq. 10-12}$$

Como consequência da atenuação, a radiação solar tem duas propriedades direcionais quando atinge a superfície terrestre, identificadas como radiação direta e difusa.

10.3.1.3 Radiação direta

A radiação direta chega a Terra vinda do disco solar e inclui pequenos componentes que se espalham. O termo “difusa” inclui todas as outras radiações vindas de céu azul e de nuvens, recebidas por reflexão ou por transmissão. A radiação direta recebida na superfície terrestre, medida a ângulos adequados dos raios incidentes, raramente excede 75% da Constante solar, isto é, em torno de 1.030 W.m^{-2} . A perda mínima é atribuída ao espalhamento molecular e à absorção em proporções quase iguais (MONTEITH e UNSWORTH, 1990).

10.3.1.4 Radiação difusa

Sob uma atmosfera limpa e completamente sem nuvens, a quantidade absoluta de radiação aumenta até um máximo que não chega a 200 W.m^{-2} . Quando o ângulo zenital (Z) é inferior a 50° a razão entre radiação difusa (Q_{dif}) e radiação total (Q_0) se situa entre 0.1 e 0.15. Com o aumento da nebulosidade, Q_{dif}/Q_0 aumenta, chegando à unidade quando o Sol é obscurecido por nuvens densas. No entanto, Q_{dif} é máximo quando a cobertura por nuvens se situa em torno de 50%.

O coeficiente de transmissão atmosférica é computado pelo método seguido por Rosati e Miykoda (1988 apud PORTELA, 1996):

$$A_t = A_{\text{dir}} + A_{\text{dif}} \quad \text{Eq. 10-13}$$

onde A_{dir} e A_{dif} são respectivamente as frações direta e difusa da radiação solar, incidentes no topo da atmosfera e que podem chegar à superfície terrestre sob condições de céu limpo. A fração direta, A_{dir} , é dada por:

$$A_{dir} = \tau^m \quad \text{Eq. 10-14}$$

onde $\tau = 0.74$ é o coeficiente de transmissão atmosférica para a radiação direta e m é a seção de massa, computada pela seguinte expressão:

$$m = 1 / \text{sen}(Z) \quad \text{Eq. 10-15}$$

onde Z é ângulo zenital em radianos.

A fração difusa, A_{dif} , é dada por:

$$A_{dif} = \frac{1 - A_a - A_{dir}}{2} \quad \text{Eq. 10-16}$$

onde $A_a = 0.09$ é o coeficiente de absorção devido à água e ao ozônio.

10.3.2 Fluxo de radiação infravermelha

O fluxo de radiação infravermelha é computado de acordo com a Lei de Stefan-Boltzman:

$$R_{br} = \varepsilon * \sigma * (273.15 + T_w)^4 \quad \text{Eq. 10-17}$$

onde R_{br} representa a radiação infravermelha (W.m^{-2}), ε a emissividade da água (0.97), σ a constante de Stefan-Boltzman ($5.669 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-4}$) e T_w a temperatura da água.

10.3.3 Fluxo de calor latente

O fluxo de calor latente promove o arrefecimento do calor no interior do corpo d'água. Ele representa a quantidade de calor consumida na evaporação. A equação implementada no MOHID é conhecida como Lei de Dalton:

$$H_L = (19.0 + 0.95U_w^2) * (e_{s,w} - r_h * e_{s,a}) \quad \text{Eq. 10-18}$$

onde H_L representa o fluxo de calor latente (m.s^{-1}), $e_{s,w}$ é a pressão de saturação da água (mmHg), r_h é a umidade relativa e $e_{s,a}$ é a pressão de saturação do ar.

O modelo apenas considera a existência de calor latente em caso de evaporação, caso contrário ele considera que o ganho de calor permanece na atmosfera.

10.3.4 Fluxo de calor sensível

A diferença entre a temperatura do ar e da água é responsável pelo fluxo de calor sensível. A equação implementada no MOHID é conhecida como a Lei de Bowen:

$$H_S = C_b * (19.0 + 0.95 * U_w^2) * (T_w - T_a) \quad \text{Eq. 10-19}$$

onde H_S representa o fluxo de calor sensível (W.m^{-2}), C_b é o coeficiente de Bowen (0.47 mmHg.K^{-1}), U_w é a velocidade do vento a 10 m de altura da superfície da água, T_w é a temperatura da água e T_a a temperatura do ar (K).

10.4 Fluxo de gás

Atualmente, somente o fluxo de oxigênio está implementado no MOHID. A fórmula utilizada é indicada abaixo

$$K_L = \alpha U_w^\beta \quad \text{Eq. 10-20}$$

onde K_L representa a velocidade de transferência do gás (m.s^{-1}), α e β são coeficientes que dependem da velocidade do vento, U_w :

$$\alpha = 0.2 \text{ if } W < 3.5 \text{ and } \alpha = 0.057 \text{ if } W > 3.5$$

$$\beta = 1.0 \text{ if } W < 3.5 \text{ and } \beta = 2.0 \text{ if } W > 3.5$$

11

MÓDULO SEDIMENTO DE FUNDO

11.1 Introdução

O Módulo Sedimento de Fundo computa as condições de contorno no fundo da coluna d'água. Ele calcula a tensão de atrito como condição de contorno para os modelos hidrodinâmico e de turbulência. Ele também é responsável por computar os fluxos na interface água-sedimento, gerenciando as condições de contorno que afetam tanto as propriedades da coluna d'água quanto as do sedimento de fundo.

Tanto na coluna d'água quanto na coluna sedimentar, as propriedades podem estar na forma dissolvida ou particulada. A evolução das propriedades dissolvidas depende fortemente dos fluxos provenientes da coluna d'água e das águas intersticiais do sedimento de fundo. Por sua vez, as propriedades na fase particulada dependem dos fluxos provenientes da coluna d'água e da velocidade de precipitação das partículas. Uma vez depositadas no fundo, elas podem tanto permanecer nessa condição como serem ressuspensas de volta para a coluna d'água. Se permanecerem depositadas por tempo suficientemente longo, podem vir a ser incorporadas ao sedimento através da consolidação.

11.2 Erosão e deposição

Para as propriedades na fase particulada, um termo de fluxo, F_b (massa de sedimento por unidade de área e tempo), é definido, correspondendo a uma fonte ou sorvedouro para o material particulado, respectivamente sob condições de erosão e deposição. Consequentemente, no fundo tem-se:

$$F_b = E - D$$

onde E e D são respectivamente o fluxo erosivo e deposicional. É assumido que, quando a tensão de atrito no fundo é menor do que um dado valor crítico, ocorre adição de material particulado ao sedimento de fundo, e quando essa tensão é superior a um dado valor crítico, ocorre erosão. Entre esses dois valores, deposição e erosão se contrabalançam.

11.2.1 Fluxo erosivo

O algoritmo que modela a erosão é baseado na clássica abordagem de Partheniades (1965). O processo erosivo ocorre quando a tensão no fundo excede o limite de erosão. O fluxo de material erodido é dado por:

$$\frac{dM_E}{dt} = E \left(\frac{\tau}{\tau_E} - 1 \right) \quad \text{for} \quad \tau > \tau_E, \quad \text{Eq. 11-1}$$

$$\frac{dM_E}{dt} = 0 \quad \text{for} \quad \tau < \tau_E, \quad \text{Eq. 11-2}$$

onde τ é a tensão de fundo, τ_E é a tensão crítica para erosão e E é a constante de erosão ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$). Uma vez que esse algoritmo foi desenvolvido especificamente para a modelagem de sedimento coesivo, quando se pretende computar os fluxos no sedimento para outras propriedades, as constantes adotadas têm que ser outras. Dessa forma, é calculada uma proporção específica para a constante de erosão, E_{prop} , para cada propriedade, relacionando a quantidade dessa propriedade em questão à quantidade de sedimento coesivo depositado no fundo, pela relação:

$$E_{prop} = E \left(\frac{M_{property}}{M_{sediment}} \right) \quad \text{Eq. 11-3}$$

Assim, a tensão crítica de atrito no fundo é considerada igual para todas as propriedades na fase particulada, de modo que a diferenciação ocorre na constante de erosão.

11.2.2 Fluxo deposicional

Com relação ao fluxo deposicional, ele pode ser definido como:

$$F_p = \frac{dm}{dt} = -pW_s C \quad \text{Eq. 11-4}$$

onde p é a probabilidade de deposição do sedimento, W_s é a velocidade de precipitação (deposição) e C é a concentração de sedimento coesivo próxima ao fundo. A probabilidade de deposição é definida por Krone (1962), como:

$$p = \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_{cd}}\right) \quad \text{Eq. 11-5}$$

onde τ_b e τ_{cd} são respectivamente a tensão de atrito observada no fundo e o seu valor crítico. Esse conceito reflete o fato de que a deposição de flocos é controlada por processos que ocorrem próximo ao sedimento de fundo. Para um floco aderir ao fundo ele precisa ser forte o suficiente para resistir à tensão que ali prevalece. O algoritmo de deposição (KRONE, 1962), assim como o algoritmo de erosão, são baseados na hipótese de que deposição e erosão nunca ocorrem simultaneamente, isto é, uma dada partícula que atinge o fundo tem uma probabilidade entre 0 e 1 de lá permanecer, conforme a tensão de atrito local varie entre o seu limite superior e inferior, respectivamente. A deposição é calculada como o produto do fluxo deposicional pela probabilidade de uma partícula permanecer no fundo, sendo formulada por:

$$\frac{dM_D}{dt} = (CW_s)_B \left(1 - \frac{\tau}{\tau_D}\right) \quad \text{for } \tau < \tau_D \quad \text{Eq. 11-6}$$

$$\frac{dM_D}{dt} = 0 \quad \text{for } \tau > \tau_D \quad \text{Eq. 11-7}$$

onde τ_D é a tensão crítica para deposição. Essa tensão depende principalmente do tamanho dos flocos envolvidos.

11.3 Tensão gerada por ondas

As ondas exercem uma força de atrito no fundo durante a sua propagação. Essa tensão, que é importante tanto para a atenuação da própria onda quanto para a ressuspensão de sedimento, é relacionada no MOHID ao coeficiente de atrito, por:

$$\tau_w = \frac{1}{2} \rho f_w U_\delta^2 \quad \text{Eq. 11-8}$$

onde

τ_w – Tensão instantânea de atrito no fundo (N.m⁻²);

f_w – Coeficiente de atrito (adimensional);

U_δ – Velocidade instantânea do fluido sobrejacente ao sedimento, na região externa à camada limite (m.s⁻¹);

ρ – Densidade do fluido (kg.m⁻³).

O fator de atrito, f_w , é assumido constante ao longo de todo o ciclo da onda, sendo determinado a partir do valor de pico, por:

$$f_w = 2\tau_w / (\rho U_\delta^2) \quad \text{Eq. 11-9}$$

A tensão média (ao longo de um ciclo completo da onda) é dada por:

$$\hat{\tau}_w = \frac{1}{4} \rho f_w \hat{U}_\delta^2 \quad \text{Eq. 11-10}$$

Em regimes de escoamento próximos ao turbulento, Jonsson (1966 apud VAN RIJN, 1989) propôs:

$$f_w = \exp \left[-6 + 5.2 \left(\frac{\hat{A}_\delta}{k_s} \right)^{-0.19} \right] \quad \text{Eq. 11-11}$$

$$f_{w,\max} = 0.3 \text{ for } \left(\frac{\hat{A}_\delta}{k_s} \right) \leq 1.57$$

onde k_s representa a rugosidade do fundo (m).

11.3.1 Parâmetros de onda

Aplicando-se a Teoria Linear de Ondas, o valor de pico da excursão orbital (\hat{A}_δ) e a velocidade (\hat{U}_δ) na borda da camada-limite podem ser expressos por:

$$\hat{A}_\delta = \frac{H}{\sinh(kh)} \quad \text{Eq. 11-12}$$

$$\hat{U}_\delta = \hat{A}_\delta \varpi = \frac{H\Pi}{T \sinh(kh)} \quad \text{Eq. 11-13}$$

onde:

$\varpi = 2\Pi / T$ – Velocidade angular (rad.s⁻¹);

$k = 2\Pi / L$ – Número de onda (rad.m⁻¹);

H – Altura da onda (m);

$L = (gt^2 / 2\Pi)\tanh(kh)$ – Comprimento da onda (m);

T – Período da onda (s);

H – Profundidade da onda (m);

A Teoria Linear de Ondas geralmente é aplicada para se obter velocidades próximas ao fundo. No caso de ondas simétricas (forma senoidal) de pequena amplitude e se propagando em águas relativamente profundas, essa teoria gera resultados corretos. Entretanto, quando as ondas vão se aproximando de águas rasas são destorcidas, gerando perfis assimétricos, de forma que teorias não lineares se tornam necessárias para se determinar velocidades próximas ao fundo. De forma surpreendente, no entanto, comparações entre valores observados e aqueles calculados pela Teoria Linear, mesmo em águas rasas, apresentam concordância bastante satisfatória.

11.3.2 Rugosidade de fundo

Marcas onduladas de ondas são formadas toda vez que um movimento oscilatório tem força suficiente para mover partículas que estejam sobre a superfície do fundo. A altura e comprimento dessas marcas onduladas aumentam até que uma forma estável seja alcançada, dependendo das condições que prevalecem no local. Quando totalmente desenvolvidas, essas marcas onduladas são bidimensionais, regulares e têm forma senoidal. Quando velocidades maiores são atingidas, o escoamento pode se descolar das marcas onduladas e fortes vórtices podem ser gerados, os quais podem varrer as partículas dos cavados para as cristas e vice-versa.

Van Rijn (1989) relaciona a altura (Δr) e comprimento (λr) da marca ao valor pico da excursão orbital (\hat{A}_δ) e a um parâmetro de mobilidade (Ψ), como segue:

$$\frac{\Delta_r}{\hat{A}_\delta}, \frac{\Delta_r}{\lambda_r} = F(\Psi) \quad \text{Eq. 11-14}$$

onde:

$$\Psi = (\hat{U}_\delta)^2 / [(\rho_{rel})gd_{50}] \quad \text{Eq. 11-15}$$

e ρ_{rel} é a densidade relativa dada por:

$$\rho_{rel} \quad \text{relative density} \left(\frac{\rho_{sand} - \rho_{water}}{\rho_{water}} \right).$$

Símbolo	Nome	Valor	Unidade
ρ_{sand}	Densidade da areia	2,3	kg.m^{-3}
ρ_{water}	Densidade da água	1,025	kg.m^{-3}
g	Gravidade	9,8	m.s^{-2}
d_{50}	Diâmetro da partícula	0,002	m
D_{90}	Diâmetro da partícula	0,003	m

Van Rijn (1989) propôs ainda as seguintes relações para ondas irregulares (não simétricas):

$$\frac{\Delta_r}{\hat{A}_\delta} = 0.22 \quad \text{for } \Psi \leq 10$$

$$\frac{\Delta_r}{\hat{A}_\delta} = 2.8 \times 10^{-13} (250 - \Psi)^5 \quad \text{for } 10 \leq \Psi \leq 250$$

$$\frac{\Delta_r}{\hat{A}_\delta} = 0 \quad \text{for } \Psi \geq 250$$

Eq. 11-16

$$\frac{\Delta_r}{\lambda_r} = 0.18 \quad \text{for } \Psi \leq 10$$

$$\frac{\Delta_r}{\lambda_r} = 2 \times 10^{-7} (250 - \Psi)^{2.5} \quad \text{for } 10 \leq \Psi \leq 250$$

$$\frac{\Delta_r}{\lambda_r} = 0 \quad \text{for } \Psi \geq 250$$

As expressões propostas para o gradiente das marcas onduladas são válidas para condições em que as ondas não se quebram. Caso contrário, o parâmetro de mobilidade, (ψ), será, em geral, maior do que 250, gerando um escoamento laminar sobre um fundo plano. Para ondas

que se quebram de forma suave, isso pode ser realístico. Entretanto, para ondas que se quebram de forma abrupta, a interação entre elas e o sedimento de fundo é tão vigorosa que uma superfície irregular será ali gerada.

Nikuradse (1932 apud VAN RIJN,1989) introduziu o conceito de rugosidade equivalente ou efetiva de areia, com o objetivo de simular valores arbitrários desse parâmetro na fronteira de fundo. No caso de um fundo móvel consistindo de sedimentos, a rugosidade efetiva será composta por rugosidades geradas por forças de superfície (atrito) e por forças de pressão que atuam sobre a forma do mesmo.

A rugosidade de grão domina quando o fundo é plano ou quando o pico da excursão orbital é menor do que o comprimento da marca ondulada.

As marcas onduladas, nesse caso, são definidas pela forma do fundo, possuindo comprimento inferior à profundidade local. Essas marcas predominam entre as formas geradas por escoamento oscilatório.

Quando a excursão orbital próxima ao fundo é maior do que o comprimento das marcas onduladas, essas se tornam a rugosidade dominante.

Assumindo-se um escoamento propenso a gerar rugosidades no fundo, e uma dada rugosidade dominante, van Rijn (1989) propôs os seguintes valores:

Para rugosidade de grão:

$$k_{s,w}^{grain} = 3d_{90} \quad \text{for } \Psi < 250 \quad \text{Eq. 11-17}$$

$$k_{s,w}^{grain} = 3(0.04\Psi - 9)d_{90} \quad \text{for } \Psi \geq 250$$

Para rugosidade de forma:

$$k_{s,w}^{form} = 16\Delta_r \frac{\Delta_r}{\lambda_r} \quad \text{for } \Psi < 250 \quad \text{Eq. 11-18}$$

$$k_{s,w}^{form} = 0 \quad \text{for } \Psi \geq 250$$

Para rugosidade de fundo:

$$k_s = \min\left[\left(k_{s,w}^{form} + k_{s,w}^{grain}\right), 0.010\right] \quad [m] \quad \text{Eq. 11-19}$$

11.4 Consolidação

O fluxo de consolidação só pode ser computado se o Módulo Sedimento estiver ativo. Esse fluxo é calculado especificando-se uma taxa de consolidação, que é aplicada sobre a massa de sedimento coesivo disponível. Para calcular-se o fluxo dessa consolidação em cada célula, primeiramente determina-se a massa disponível durante o intervalo de tempo utilizado na integração do processo de consolidação. Se o valor médio assim obtido for superior à massa disponível antes do início do intervalo de integração, então se considera, para essa célula, que o fluxo deposicional excede o erosivo, ou, em outras palavras, que os flocos permanecem aí por tempo suficientemente longo para se tornarem consolidados. O algoritmo utilizado no MOHID obedece à formulação dada por:

$$M_{average} = \frac{\sum_{t=t_0}^{t_{consolidation}} M_t \times dt}{dt_{consolidation}} \quad \text{Eq. 11-20}$$

$$\frac{dM}{dt} = Mr_c, \quad \text{for } M_{average} > M_{t_0} \quad \text{Eq. 11-21}$$

onde $M_{average}$ é a massa média disponível ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}$), M_t é a massa disponível em um dado passo de tempo ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}$), dt é o passo de tempo (s) utilizado na simulação do transporte de sedimento coesivo, $dt_{consolidation}$ é o intervalo de tempo utilizado na integração do processo de consolidação (s), t_0 e $t_{consolidation}$ são respectivamente o tempo inicial e final utilizado nesse intervalo de integração, e r_c é a taxa de consolidação.

Uma vez computado o fluxo de consolidação para o sedimento, ele é também calculado para outras propriedades que estejam na fase particulada, por meio de um fator de proporcionalidade entre a

propriedade em questão e a massa de sedimento disponível, a exemplo do procedimento adotado para se calcular o fluxo erosivo, como segue:

$$F_{property\ consolidation} = F_{consolidation} \times \frac{M_{property}}{M_{sediment}} \quad \text{Eq. 11-22}$$

onde $F_{property\ consolidation}$ é o fluxo de consolidação de dada propriedade, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$, $F_{consolidation}$ é o fluxo de consolidação do sedimento, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$, $M_{property}$ e $M_{sediment}$ são respectivamente a massa da propriedade em questão e de sedimento disponíveis no fundo, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}$.

11.5 Outras notas

E possível se definir no sedimento de fundo diversas propriedades, tanto na fase dissolvida quanto na particulada. Para cada propriedade presente na coluna d'água o sedimento de fundo pode ser considerado como uma fonte inextinguível de massa ou, alternativamente, se considerar que a massa disponível é limitada. Se a massa é considerada ilimitada, processos erosivos devem ocorrer, eliminando dessa forma a necessidade de se avaliar quanto de massa está disponível em cada instante da simulação. Por outro lado, se a limitação é considerada, alguns cuidados devem ser tomados para se controlar os processos erosivos. Nesse caso um valor mínimo de massa disponível deve ser definido. Se, por algum motivo, o fluxo erosivo calculado estabelece que uma quantidade de massa maior do que a disponível será erodida, esse fluxo é reajustado de modo que toda a massa disponível é erodida. Dessa forma, um fluxo erosivo potencial é calculado, sendo que sua limitação é função da massa disponível para erosão. Como a variável que representa o fluxo erosivo é alterada nessa situação, o seu valor de saída informado pelo modelo é o fluxo que de fato ocorre.

Uma abordagem similar é adotada para se computar o fluxo de consolidação, caso esse exceda a massa de sedimento de fato disponível.

11.6 Fluxo de propriedades dissolvidas

Propriedades dissolvidas podem ser geradas no sedimento de fundo,

mas nunca permanecem lá. Isso significa que, uma vez produzidas, elas são imediatamente incorporadas à coluna d'água. Dessa forma, considera-se o sedimento de fundo como constituído apenas de material particulado, de maneira que a própria água intersticial faz parte da coluna d'água.

12

MÓDULO MOVIMENTO VERTICAL LIVRE

12.1 Introdução

O Módulo Movimento Vertical Livre computa o fluxo vertical de propriedades na fase particulada. Ele normalmente é utilizado para calcular a velocidade de deposição do sedimento coesivo ou da matéria orgânica particulada.

12.2 Metodologia

Duas diferentes abordagens são seguidas para se computar a velocidade de deposição do sedimento em suspensão: a adoção de uma velocidade constante de deposição ou de uma velocidade que depende da concentração de sedimento na coluna d'água. No primeiro caso, cada propriedade particulada tem uma específica e constante velocidade de deposição. Essa pode ser considerada uma abordagem razoável para partículas livres, sem formação de flocos, que estejam sendo depositadas.

Já na segunda abordagem, o MOHID considera apenas duas faixas de concentração, uma na qual ocorre a floculação e na outra, a decantação impedida. A formulação adotada para a faixa de concentração que ocorre floculação é dada por:

$$W_S = K_1 C^m \quad \text{for } C < C_{HS} \quad \text{Eq. 12-1}$$

e para a faixa de decantação impedida:

$$W_S = K_1 C_{HS}^m [1.0 - K_2 (C - C_{HS})]^{m_1} \quad \text{for } C > C_{HS} \quad \text{Eq. 12-2}$$

onde W_s ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) é a velocidade de deposição, C ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$) é a concentração, e o HS subscrito se refere à concentração a partir da qual a decantação impedida passa a ocorrer (algo entre 2 e 5 $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$). Os coeficientes K_1 ($\text{m}^4\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$) e K_2 ($\text{m}^3\cdot\text{kg}^{-1}$) dependem da mineralogia do sedimento, sendo que os expoentes m and m_1 dependem do tamanho e da forma das partículas.

13

MÓDULO ARQUIVO HIDRODINÂMICO

13.1 Introdução

Nesta seção o Módulo Arquivo Hidrodinâmico do MOHID é descrito. Ele pode ser visto como um módulo auxiliar, que permite ao usuário integrar a solução hidrodinâmica no tempo e no espaço e armazená-la em um arquivo. Esse arquivo pode ser utilizado posteriormente para simular períodos mais longos, por exemplo, para aplicações em simulação de qualidade de água, que exigem períodos de pelo menos um ano.

A integração espacial consiste no agrupamento de diversas células do *grid* em uma única célula, que pode ser realizado para qualquer grupo quadrado de células, como 2x2 ou 3x3. Esse agrupamento resulta em uma drástica redução de pontos onde são computadas as variáveis simuladas. Por exemplo, no caso de um agrupamento 2x2 de células, o domínio resultante irá conter apenas a quarta parte dos pontos definidos no *grid*, cada um com o dobro do tamanho, tanto na extensão horizontal quanto na vertical. A Figura 13-1 mostra uma representação esquemática da integração espacial 2x2. O número total de pontos do *grid* reduz-se de 16 para 4.

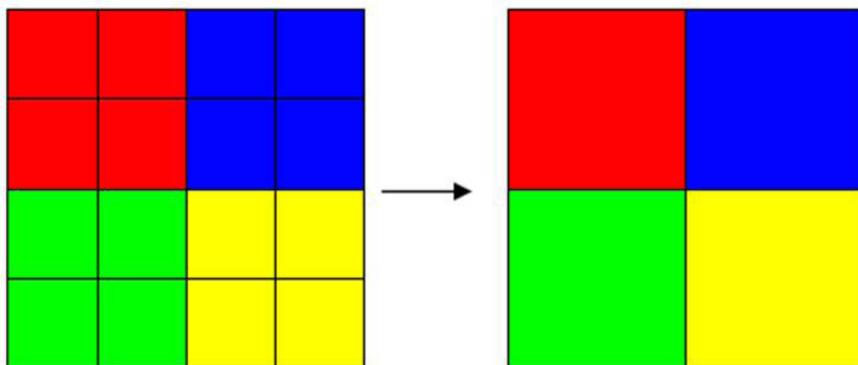


Figura 13-1: Representação esquemática da integração espacial

A integração no tempo consiste em uma integração ao longo de vários passos de tempo em que é resolvido o modelo hidrodinâmico. Ela pode estar diretamente conectada à integração espacial. Desde que as dimensões das células que compõem o *grid* tenham sido aumentadas através da integração espacial, a integração no tempo permite rodar o modelo com passos de tempo maiores. No caso de transporte de massa, a celeridade que controla a estabilidade do modelo não é a velocidade de propagação da onda de pressão, mas sim a velocidade máxima do escoamento. A solução hidrodinâmica integrada no tempo e no espaço é armazenada em um arquivo, e pode ser utilizada posteriormente de forma mais rápida. Com relação ao tempo, há duas maneiras diferentes de armazenar essa informação: como uma solução integrada, com data de início e fim, ou como uma solução que se repete (dentro de um ciclo de maré).

O uso do módulo “arquivo hidrodinâmico” tem mostrado que os erros introduzidos através do processo de integração são pequenos, e não significativos para simulações de qualidade de água de longos períodos.

O fluxo de informação entre o módulo “arquivo hidrodinâmico” e os demais módulos é mostrado na Figura 13-2. Na parte de cima do diagrama é mostrada a gravação do arquivo, enquanto que na parte de baixo está representado o acesso à solução que nele é armazenada.

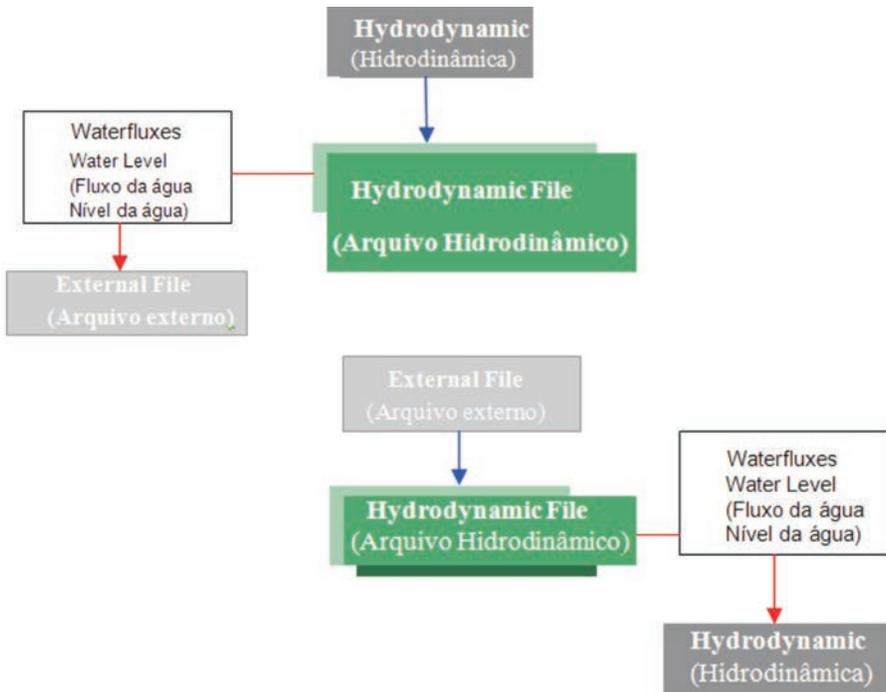


Figura 13-2: Fluxo de informação entre o Módulo Arquivo Hidrodinâmico e outros módulos

13.2 Metodologia

A integração espacial é dividida em duas etapas:

1. Calcule-se uma batimetria integrada, baseada em uma batimetria com mais alta resolução;
2. Em cada passo de integração, a soma de todos os fluxos de água que atravessam uma face de célula é armazenada em um arquivo de saída. A elevação média em cada célula é igualmente armazenada em um arquivo de saída.

13.2.1 Integração da batimetria

A integração da batimetria pode ser realizada de duas maneiras distintas. Em ambas, antes de se proceder à integração, os pontos

de terra do domínio são preenchidos com a profundidade mínima encontrada entre as células que serão integradas. A primeira forma de integração é designada como “Integração Média”. Esse método calcula a profundidade média das células que serão integradas, adotando esse valor médio como a profundidade da nova batimetria. A Figura 13-3 mostra a integração da batimetria por esse método. Pontos cobertos por água estão em azul, enquanto que os emersos têm a coloração cinza.

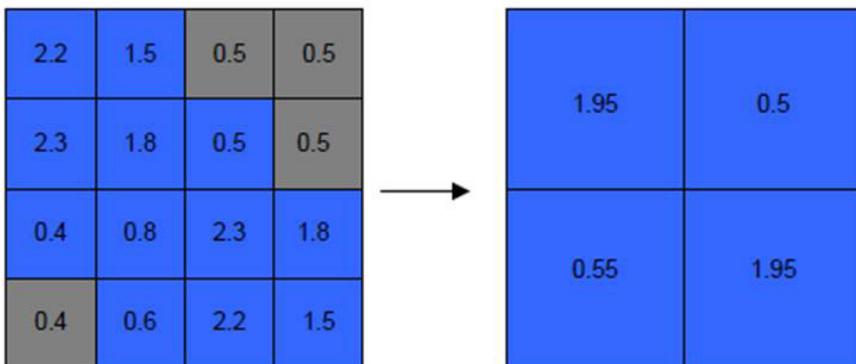


Figura 13-3: Integração da batimetria pelo método da “Integração Média”

A segunda forma de se proceder à integração é designada por “Integração Máxima”. Nesse método toma-se a maior profundidade encontrada entre as células que serão integradas, multiplicada pela área de cada célula, dividindo-se o resultado assim obtido pela área total de ponto cobertos por água.

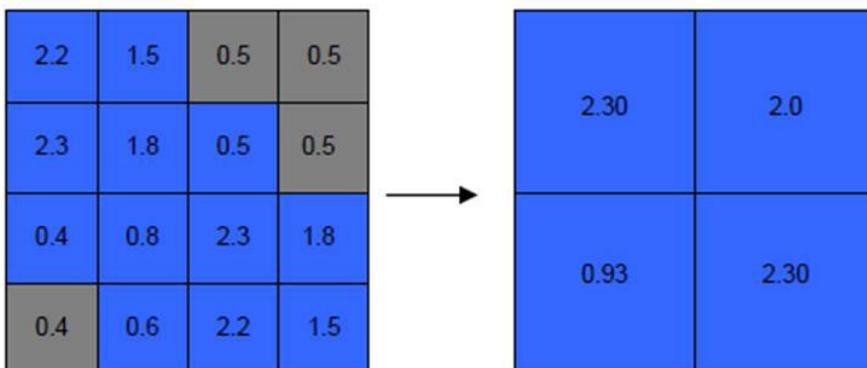


Figura 13-4: Integração da batimetria pelo método da “Integração Máxima”

13.2.2 Integração dos fluxos de água

O fluxo de água entre duas células é calculado como o fluxo médio entre ambas. Esse fluxo pode ser integrado ao longo de vários passos de tempo e essa integração se expressa por:

$$Q_i = \sum_1^{nCells} \sum_1^{nSteps} q_i / nSteps \quad \text{Eq. 13-1}$$

A Figura 13-5 apresenta a representação esquemática da integração dos fluxos de água sobre uma batimetria já integrada.

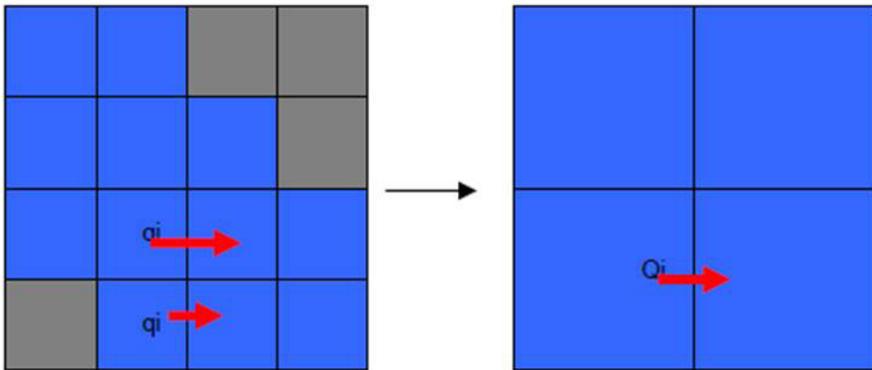


Figura 13-5: Representação esquemática da integração dos fluxos de água

14

REFERÊNCIAS

14.1 Visão Geral

BOWIE, G. L.; MILLS, W. B.; PORCELLA, D. B.; CAMBELL, C. L.; PAGENDORF, J. R.; RUPP, G.L.; JOHNSON, K. M.; CHAN, P.W.; GHERINI, S. A.; CAMBERLIN, C. E. *Rates, Constants and Kinetic Formulations in Surface Water Quality Modeling*. U. S. Environmental Protection Agency, 1985.

BRAUNSCHWEIG, F *Generalização de um modelo de circulação costeira para albufeiras*. Tese (Mestrado) - Instituto Superior Técnico, Technical University of Lisbon, 2001.

CANCINO, L.; NEVES, R. Hydrodynamic and sediment suspension modelling in estuarine systems. Part II: Application to the Western Scheldt and Gironde estuaries, *Journal of Marine Systems*, v.22, 117-131, 1999.

COELHO, H.; SANTOS, A.; ROSA, T. L.; NEVES, R. Modelling the wind driven flow off Iberian Peninsula, *GAIA*, v.8, p.71-78, 1994.

DECYK, V. K.; NORTON, C. D.; SZYMANSKI, B. K. Expressing Object-Oriented Concepts in Fortran90. *ACM Fortran Forum*, v. 16, 1997.

LEITÃO, P. C. *Modelo de Dispersão Lagrangeano Tridimensional*. Tese (Mestrado) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1996.

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

NEVES, R.; COELHO, H.; LEITÃO, P.; MARTINS, H.; SANTOS, A. A numerical investigation of the slope current along the western European margin. In: BURGANO, V.; KARATZAS, G.; PAYATAKAS, A.; BREBBIA, C.; GRAY, W.; PINDER, G. (Ed.). In: COMPUTACIONAL METHODS IN WATER RESOURCES, 12., 1998. v.2, p. 369-376, 1998.

MARTINS, F. *Modelação Matemática Tridimensional de Escoamentos Costeiros e Estuarinos usando uma Abordagem de Coordenada Vertical Genérica*. Thesis (Ph. D.) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1999.

MARTINS, F.; LEITÃO, P.; SILVA, A.; NEVES, R. 3D modeling in the Sado estuary using a new generic vertical discretization approach. *Oceanologica Acta*, 2000.

MIRANDA, R. *Nitrogen Biogeochemical Cycle Modeling in the North Atlantic Ocean*. Tese (Mestrado) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1999.

MIRANDA, R.; BRAUNSCHWEIG, F.; LEITÃO, P.; NEVES, R.; MARTINS, F.; SANTOS, A. *Mohid 2000, A Costal integrated object oriented model*. WIT Press, 2000. Hydraulic Engineering Software VIII

MONTERO, P.; GÓMES-GESTERIRA, M.; TABOADA, J. J.; RUIZ-VILLARREAL, M.; SANTOS, A. P.; NEVES, R. J. J.; PREGO, R.; PÉREZ-VILLAR, V. On residual circulation of Vigo Ría using a 3D baroclinic model. *Boletín Instituto Español de Oceanografía*, n. 15, Supl. 1, 1999.

MONTERO, P. *Estudio de la hidrodinámica de la Ría de Vigo mediante un modelo de volúmenes finitos* (Study of the hydrodynamics of the Ría de Vigo by means of a finite volume model), Dissertation (Ph.D.) - Universidad de Santiago de Compostela, Spanish, 1999.

PÉREZ-VILLAR, V. *Ordenación Integral del Espacio Marítimo-Terrestre de Galicia: Modelización informática'* (Integrated Management of the Galician Maritime-Terrestrial Space: Numerical Modelling). Final report by the Grupo de Física Non Lineal, Consellería de Pesca, Marisqueo e Acuicultura. Xunta de Galicia, 1999.

SANTOS, A. J. *Modelo Hidrodinâmico Tridimensional de Circulação Oceânica e Estuarina*. Thesis (Ph. D.) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1995.

TABOADA, J.J.; PREGO, R.; RUIZ-VILLARREAL, M.; MONTERO, P.; GÓMES-GESTEIRA, M.; SANTOS, A.; PÉREZ-VILLAR, V. Evaluation of the seasonal variations in the residual patterns in the Ría de Vigo (NWSpain) by means of a 3D baroclinic model. *Estuarine Coastal and Shelf Science*, v.47, p. 661-670, 1998.

TABOADA, J.J.; RUÍZ-VILLARREAL, M.; GÓMES, GESTEIRA, M.; MONTERO, P.; SANTOS, A. P.; PÉREZ-VILLAR, V.; PREGO, R. Estudio del transporte en la Ría de Pontevedra (NOEspaña) mediante un modelo 3D: Resultados preliminares. In: COSTA, A.; VALE, C.; PREGO, R. (Eds). *Estudos de Biogeoquímica na zona costeira ibérica*. Portugal: Serviço de Publicações da Universidade de Aveiro in press, 2000.

TABOADA, J.J. *Aplicación de modelos numéricos al estudio de la hidrodinámica y del flujo de partículas en el Mar Mediterráneo (Application of numerical models for the study of hydro-dynamics and particle fluxes in the Mediterranean Sea)*. Dissertation (Ph. D.) - Universidad de Santiago de Compostela, Spanish, 1999.

VILLARREAL, M.R.; MONTERO, P.; PREGO, R.; TABOADA, J.J.; LEITÃO, P.; GÓMES-GESTEIRA, M.; CASTRO, M.; PÉREZ-VILLAR, V. Water Circulation in the Ria de Pontevedra under estuarine conditions using a 3d hydrodynamical model. Submitted to *Est. Coast. and Shelf Sc.*, 2000.

14.2 Módulo Geometria

ARAKAWA, A.; LAMB, V.R. Lamb. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA General Circulation Model. *Methods of Computational Physics*, v.17, p.174-264, 1977.

CHIPPADA S.; DAWSON, C.; WHEELWE, M. Wheeler. Agodonov-type finite volume method for the system of shallow water equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, v.151, n.01, p.105-130, 1998.

HIRSCH, C. *Numerical computation of internal and external flows*. Chichester: John Wiley and Sons, 1988. 515p. v.1: Fundamentals of numerical discretization. (Wiley Series in Numerical Methods in Engineering).

MARTINS, F. *Modelação Matemática Tridimensional de Escoamentos Costeiros e Estuarinos usando uma Abordagem de Coordenada Vertical Genérica*. Thesis (Ph. D.) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1999.

MARTINS, F.; LEITÃO, P.; SILVA, A.; NEVES, R. 3D modeling in the Sado estuary using a new generic vertical discretization approach. *Oceanologica Acta*, 2000.

MONTERO, P. *Estudio de la hidrodinámica de la Ría de Vigo mediante un modelo de volúmenes finitos (Study of the hydrodynamics of the Ría de Vigo by means of a finite volume model)*. Dissertation (Ph.D.) - Universidad de Santiago de Compostela, Spanish, 1999.

14.3 Módulo Hidrodinâmico

ABBOTT, M.B.; DAMSGAARD AND, A.; RODENHUIS, G.S. System 21, Jupiter, a design system for two dimensional nearly horizontal flows. *J. Hyd. Res*, v.1, p.1-28, 1973.

BACKHAUS, J. A three dimensional model for the simulation of shelf sea dynamics. *Dt. Hydrogr.Z.*, v.38, p.165-187, 1985.

FLETCHER, C.A.J. *Computational techniques for fluid dynamics*. 2nd ed. New York: Springer Verlag, 1991. v.1. 401 p. (Springer Series in Computational Physics).

JAMES, I.D. A general three-dimensional eddy-resolving model for stratified seas. In: NIHOUL, J.C.; JAMART, B.M. (Eds). *Three-dimensional models of marine and estuarine dynamics*. Amsterdam: Elsevier, 1987. p. 1-33, 1987. (Elsevier Oceanography Series, 45).

LEENDERTSEE, J.J. (1967). *Aspects of a computational model for long water wave propagation*. Rand Corporation, Memorandum RM-6230-RC, Santa Monica, 1970.

MARTINS, F. *Modelação Matemática Tridimensional de Escoamentos Costeiros e Estuarinos usando uma Abordagem de Coordenada Vertical Genérica*. Thesis (Ph. D.) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1999.

MONTERO, P. *Estudio de la hidrodinámica de la Ría de Vigo mediante un modelo de volúmenes finitos (Study of the hydrodynamics of the Ría de Vigo by means of a finite volume model)*. Dissertation (Ph.D.) - Universidad de Santiago de Compostela, Spanish, 1999.

PALMA, E.; MATANO, R. P. On the implementation of passive open boundary conditions for a general circulation model: The barotropic mode. *Journal of Geophysical Research*, v.103, p.1319-1342, 1998.

SANTOS, A. J. *Modelo Hidrodinâmico Tridimensional de Circulação Oceânica e Estuarina*. Thesis (Ph. D.) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 1995.

14.4 Módulo Lagrangiano

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

COSTA, M. V. A Three-Dimensional Eulerian-Lagrangian Method for Predicting Plume Dispersion. In: *Natural Waters - Diplôme d'Etudes Approfondies Européen en Modélisation de l'Environnement Marin - ERASMUS*, 1991.

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

14.5 Módulo Petróleo

BUCHANAN, I.; HURFORD, N. Methods for predicting the physical changes in oil spilt at sea. *Oil & Chemical Pollution*, v.4, n.4, p. 311-328, 1988.

DELVIGNE, G.A.L.; SWEENEY, C.E. Natural Dispersion of Oil. *Oil & Chemical Pollution*, v.4, p. 281-310, 1998.

FAY, J.A. *The spread of oil slicks on a calm sea: Oil on the Sea*. NY: Plenum Press, , 1969. p. 53-63.

FINGAS, Mervin. The evaporation of oil spills: development and implementation of new prediction methodology. In: MARINE ENVIRONMENTAL MODELLING SEMINAR'98, 1998, Lillehammer, Norway.

FLORES, H.; ANDREATTA, A.; LLONA, G.; SAAVEDRA, I. *Measurements of oil spill spreading in a wave tank using digital image processing: Oil and hydrocarbon spills, modeling, analysis and control*. Southampton, UK: WIT Press, 1998. p.165-173.

HUANG, J.C.; MONASTERO, F.C. *Review of the state-of-the-art of oil spill simulation models*. Final Report submitted to the American Petroleum Institute, 1982.

LEITÃO, Paulo. *Modelo de dispersão lagrangeano tridimensional*. Dissertação (Mestrado) - Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa, 1996.

MACKAY, D.; BUISTT, A.; MASCARENHAS, R.; PATERSON, S. Oil spill processes and models. *Environment Canada Manuscript Report*, n. EE-8, Ottawa, Ontário, 1980.

MOONEY, M. *The viscosity of a concentrated suspension of spherical particles*. *J Colloidal Science*, v.10, p. 162-170, 1951.

NOAA. ADIOS™ (*Automated Data Inquiry for Oil Spills*) user's manual. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. 1994. 50p. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut,

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

PAYNE, J.R.; KIRSTEIN, B.E.; CLAYTON, J.R.; CLARY, R.; REDDING, R.; McNABB, D.; FARMER, G. *Integration of Suspended Particulate Matter and Oil Transportation Study*. Final Report, Report to Minerals Management Service, MMS 87-0083, 1987.

PROCTOR, R.; FLATHER, R.A.; ELLIOT, A.J. Modelling tides and surface drift in the Arabian Gulf – application to the Gulf oil spill. *Continental Shelf Res.*, v.14, p. 531-545, 1994.

RASMUSSEN, D. Oil Spill Modelling – A tool for cleanup operations. In: OIL SPILL CONFERENCE, 1985. *Proceedings...* American Petroleum Institute, 1985. p. 243-249.

REED, M. The physical fates component of the natural resource damage assessment model system. *Oil & Chemical Pollution*, v.5, p. 99-123, 1989.

STIVER, W.; MACKAY, D. Evaporation rate of spills of hydrocarbons and petroleum mixtures. *Environmental Science and Technology*, v.18, n.11, p. 834-840, 1984.

14.6 Módulo Propriedades da Água

LEEDERTSEE, J.J.; LIU, S.K. A three-dimensional turbulent energy model for non-homogeneous estuaries and coastal sea systems. In: NIHOUL, J.C.J. (Ed.). *Hydrodynamics of Estuaries and Fjords*. Amsterdam: Elsevier Publ. Co., 1978. p. 387-405.

UNESCO. Tenth Report on the joint panel on oceanographic tables and standards. *Technical papers in marine science*, n. 36, 1981. 24 p.

14.7 Módulo Qualidade da Água

ARHONDITSIS, G.; TSIRTSIS, G.; ANGELIDIS, M.O.; KARYDIS, M. Quantification of the effects of nonpoint nutrient sources to coastal marine eutrophication: application to a semi-enclosed gulf in the Mediterranean Sea. *Ecological Modelling*, v.129, p. 209-227, 2000.

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

EILERS, P.H.C.; PEETERS, J.C.H. A model for the relationship between light intensity and the rate of photosynthesis in phytoplankton. *Ecol. Modelling*, v.42. p. 113-133, 1988.

FALKOWASKI, P.G.; WIRICK, C.D. A simulation model of the effects of vertical mixing on primary productivity. *Mar Biol.*, v. 65, p. 69-75, 1981.

- FRANSZ, H.G.; MOMMAERTS, J. P.; RADACH, G. Ecological Modelling of the North Sea. *Netherlands Journal of Sea Reserch*, v. 28, n.1/2, p. 67-140, 1991.
- HUMBORG, C.; FENNEL, K.; PASTUSZAK, M.; FENNEL, W. A box model approach for a long-term assessment of estuarine eutrophication, Szczecin Lagoon, southern Baltic. *Journal of Marine Systems*, v.25, p. 387-403, 2000.
- MARTINS, M.; DUFNER, M.J.L. Estudo da qualidade da água. Resultados referentes às observações sinópticas em 1980. *Estudo Ambiental do Estuário do Tejo (2ªsérie)*, Comissão Nacional do Ambiente, Lisboa, n.14, p.1-212, 1982.
- NAKATA, K.; HORIGUCHI, F.; YAMAMURO, M. Model study of Lakes Shinji and Nakaumi – a coupled coastal lagoon system. *Journal of Marine Systems*, v. 26, p. 145- 169, 2000.
- NAPOLITANO, E.; OGUZ, T.; MALANOTTE-RIZZOLLI, P.; YILMAZ, A.; SANSONE, E. Simulation of biological production in the Rhodes and Ionian basins of the eastern Mediterranean. *Journal of Marine Systems*, v. 24, p. 277-298, 2000.
- NEUMANN, T. Towards a 3D-ecosystem model of the Baltic Sea. *Journal of Marine Systems*, v.25, p. 405-419, 2000.
- PARSONS, T.R.; TAKAHASHI, M.; HARGRAVE, B. *Biological oceanographic processes*. 3rd. ed. Oxford: Pergamon Press, 1984. 330 p.
- PINA, P. M. N. *An Integrated Approach to Study the Tagus Estuary Water Quality*. Tese (Mestrado) - Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 2001.
- PLATT, T.; GALEGGOS, C.L.; HARRISON, W.G. Photoinhibition of photosynthesis in natural assemblages of marine phytoplankton. *J. Mar. Res.*, v. 38, p.687-701, 1980.
- PORTELA, L. *Modelação matemática de processos hidrodinâmicos e de qualidade da água no Estuário do Tejo*. Dissertação (Doutorado em Engenharia do Ambiente) - Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, 1996. 240 p.

RIVERA, P.C. *Hydrodynamics, sediment transport and light extinction off Cape Bolinao, Philippines*. Dissertation (Ph D) - A.A.Balkema/Rotterdam/Brookfield, 1997.

SOMLYÓDY, L., KONCSOS, L. Influence of sediment resuspension on the light conditions and algal growth in lake Balaton. *Ecological Modelling*, v.57, p. 173-192, 1991.

STEELE, J. H. Environmental control of photosynthesis in the sea. *Limnology and Oceanography*, v.7, p. 137-150, 1962.

TETT, P.; WILSON, From biogeochemical to ecological models of marine microplankton. *Journal of Marine Systems*, v.25, p.431-446, 2000.

THORNTON, K. W.; LESSEN, A. S. A temperature algorithm for modifying biological rates. *Trans. Am. Fish. Soc.*, v.107, n.2, p. 284-287, 1978.

VALIELA, I. *Marine ecological processes*. New York: Springer-Verlag, 1995. 686p.

VILA, X.; COLOMER, L.J.; GARCIA-GIL. Modelling spectral irradiance in freshwater in relation to phytoplankton and solar radiation. *Ecological Modelling*, v. 87, p. 56-68, 1996.

14.8 Módulo Superfície

BROCK, T. D. Calculating solar radiation for ecological studies. *Ecological Modelling*, 1981.

14.9 Módulo Sedimento de Fundo

KRONE, R.B. Flume studies of the transport in estuarine shoaling processes. *Hydr. Eng. Lab.*, Univ. of Berkeley, California, USA, 1962.

PARTHENIADES, E. Erosion and deposition of cohesive soils. *J. Hydr. Div.*, ASCE, 91, n. HY1, p. 105-139, 1965.

MOHID
DESCRIÇÃO
do MOHID



INSTITUTO
SUPERIOR
TÉCNICO



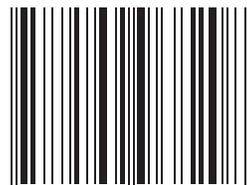
Secretaria de Educação
Profissional e Tecnológica

Ministério
da Educação



MARETEC
Instituto Superior Técnico
Universidade Técnica de Lisboa
<http://www.mohid.com/>

ISBN 978-85-99968-20-8



9 788599 1968208