

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

HENERY FERREIRA GARÇÃO

**DESENVOLVIMENTO DE MODELO LAGRANGIANO
DE PARTÍCULAS CONSIDERANDO OS EFEITOS DO
VENTO E ESPALHAMENTO DE MANCHAS DE ÓLEO**

VITÓRIA

2010

HENERY FERREIRA GARÇÃO

**DESENVOLVIMENTO DE MODELO LAGRANGIANO DE PARTÍCULAS
CONSIDERANDO OS EFEITOS DO VENTO E ESPALHAMENTO DE MANCHAS
DE ÓLEO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Recursos Hídricos.

Orientador: Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana.

Co-orientador: Prof. Dr. Maxsuel Marcos Rocha Pereira.

VITÓRIA

2010

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Central da Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

Garção, Henery Ferreira, 1985-
G215d Desenvolvimento de modelo lagrangiano de partículas considerando os efeitos do vento e espalhamento de manchas de óleo / Henery Ferreira Garção. – 2010.
95 f. : il.

Orientador: Julio Tomás Aquije Chacaltana.

Co-Orientador: Maxsuel Marcos Rocha Pereira.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) –
Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Modelagem de dados. 2. Derramamento de óleo. 3. Ventos. 4. Lagrange, Equações de. I. Chacaltana, Julio Tomás Aquije. II. Pereira, Maxsuel Marcos Rocha, 1965-. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 628



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

**DESENVOLVIMENTO DE MODELO LAGRANGIANO DE PARTÍCULAS CONSIDERANDO OS
EFEITOS DO VENTO E ESPALHAMENTO DE MANCHAS DE ÓLEO**

HENERY FERREIRA GARÇÃO

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana
Orientador – UFES

Prof. Dr. Maxsuel Marcos Rocha Pereira
Co-orientador – UFES

Prof. Dr. José Antonio Tosta dos Reis
Examinador Interno – UFES

Prof. Dr. Roger Matsumoto Moreira
Examinador Externo – UFF

“A vida não é uma pergunta a ser respondida. É um mistério a ser vivido.”

Sidarta Gautama.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Edson e Sônia, e meu irmão, Bruno, por todo carinho, amor, dedicação, apoio, paciência e ensinamentos.

A Vanessa, por me “aturar” nestes anos de mestrado, sem mencionar os anos de graduação, sempre me incentivando e cuidando de mim.

Aos meus amigos de ensino médio, Hasta e Vinicius, que desde daquela época têm sido companheiros.

Aos meus amigos de graduação, Paula e Wright, e de Saneamento Ambiental, Levi, que apesar estarmos mais afastados, estão sempre presentes.

Ao professor Julio Chacaltana, pelas horas dedicadas à orientação e apoio a todos os estudos que realizamos, e pela amizade e respeito.

Uma gratidão as pessoas que são e que foram do LABESUL, em destaque Prussia, Felipe, Gregório, Fabio, André, Rafael, Thiago, Vanessa, Marina e Izabel.

Agradeço a ANP – PRH 29, pelo apoio financeiro.

RESUMO

A modelagem computacional é uma importante ferramenta para estimar a trajetória e destino final de manchas de óleo em diferentes condições ambientais, visto a complexidade dos processos que atuam nesse poluente. O presente trabalho concentrou os esforços no desenvolvimento de um modelo lagrangiano de trajetória de partículas que simule o movimento de manchas de óleo em ambiente marinho. O modelo utilizado é o Modelo Lagrangiano de Partículas com Deslocamento Aleatório (MLPDA), que é baseado na equação de Langevin. Em princípio, o algoritmo da advecção da mancha de óleo devido ao vento é implementado no MLPDA, visto sua importância ao deslocamento das partículas. É considerado que 3% da velocidade do vento a 10 metros de altura permite uma boa representação da deriva de manchas de óleo em ambiente marinho. Os testes para este algoritmo apresentaram resultados satisfatórios. Posteriormente, é implementado um algoritmo que representa o processo físico de espalhamento do óleo, conhecido também por espalhamento mecânico, que é definido como o movimento horizontal devido às forças gravitacionais, viscosas e inerciais. No presente estudo, esse processo é fundamentado nas equações definidas por Lehr *et al.* (1984), onde os resultados dos testes mostraram que as partículas espalham conforme exposto por esse mesmo autor e são influenciadas até cerca de 100 h de simulação. Ainda neste estudo, é avaliado o módulo de cálculo de área implementado no MLPDA. É advertido que malhas grosseiras podem resultar em áreas superestimadas, sendo aconselhável o uso de malhas mais refinadas para o cálculo dessas áreas. Por fim, três cenários de simulação de um derrame hipotético de óleo na Baía do Espírito Santo, no interior do Porto de Tubarão, são conduzidos para ilustrar uma aplicação do modelo desenvolvido. As simulações expõem que há grandes diferenças entre os resultados obtidos, principalmente entre o cenário que desconsidera o vento e os outros dois com a consideração desta forçante. O primeiro cenário, as partículas tenderam a permanecer na Baía do Espírito Santo, enquanto para os demais cenários as partículas caminharam para os canais do sistema estuarino da Grande Vitória (Canal da Passagem e Canal de Acesso aos Portos).

Palavras-chave: modelagem lagrangiana, modelagem de derrames de óleo, vento, espalhamento.

ABSTRACT

The computational modeling is an important tool to predict the trajectory and fate of the slick oil in different environmental conditions, since the complexity of processes involving oil spill. Thus, the present study has concentrated efforts on developing of a particle tracking lagrangian model that simulate the oil slick movement in the marine environment. The model used is Lagrangian Particles Random Walk Model (MLPDA), that it is based on the Langevin equation. First, the algorithm of the advection of the oil slick due to wind is implemented in the Random Walk Particle Lagrangian Model (MLPDA), seen its importance to the displacement of particles. It is considered that 3% of the wind velocity at 10 meters height allows a good representation of the drift of the slicks. The tests for this algorithm presented satisfactory results. Posteriorly, is implemented an algorithm that represents the physical process of spreading, also known as mechanic spreading, that is defined as the horizontal movement due to gravitational, viscous and inertial forces. In the present study, this process is based on the equations defined by Lehr *et al.* (1984), where the results of the tests showed that the particles spread as shown by this author and they are influenced up to 100 hours of simulation. In addition, it is evaluate the module for calculation the area implemented in MLPDA. It is adverted that very coarse grid may result in overrated areas, being advisable to use fine grid for calculation of these areas. Finally, three scenarios of simulation of a hypothetic oil spill at the Espírito Santo Bay, in the Tubarão Port, are conducted to illustrate an application of the model development. The simulations show large differences among the results obtained, mainly among the scenario that neglect the wind and the other two with the consideration of this forcing. The first scenario, the particles tended to remain at the Espírito Santo Bay, while other scenarios the particles walked to the channels of the Great Vitória estuarine system (Passage Channel and Access Channel to Ports).

Keywords: lagrangian model, oil spill modeling, wind, spreading.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Localização dos pontos de cálculo das variáveis na malha computacional.....	27
Figura 2. Representação da reflexão de uma partícula no modelo de transporte. Fonte: Santiago, 2007.....	32
Figura 3. Fluxograma com as etapas do MLPDA para o cálculo das posições das partículas e concentração média pelo método box.....	33
Figura 4. Exemplo do esquema de cálculo da área da mancha de óleo no MLPDA. Área em vermelho seria contabilizada neste exemplo.....	35
Figura 5. Processos que ocorrem óleo derramado de acordo com o tempo. Fonte: Paladino, 2000.....	36
Figura 6. Relevância dos processos que ocorrem óleo derramado de acordo com o tempo. Fonte: Paladino, 2000.....	37
Figura 7. Representação da mancha de óleo em duas partes distintas: porção espessa (thick portion) e a porção fina (sheen ou thin film). Fonte: Lehr & Simecek-Beatty, 2000.....	40
Figura 8. As três fases de espalhamento de uma mancha de óleo. Fonte: Paladino, 2000.....	41
Figura 9. Comparação de área prevista por teoria e área medida: A: Teoria de Fay (1969); B: Teoria de Lehr et al. (1984a). Fonte: Lehr et al., 1984b.....	43
Figura 10. Porcentagem de perda por evaporação em diferentes tipos de óleo. Modificado de Ocean Studies Board and Marine Board, 2003.....	45
Figura 11. Algoritmo do MLPDA com o cálculo do efeito do vento inserido.....	52
Figura 12. Deslocamento da partícula pelo transporte do vento.....	53
Figura 13. Modelo para o mecanismo de espalhamento de uma mancha de óleo. Adaptado de Guo et al. (2009).....	55

Figura 14. Translação de sistemas de coordenadas para o cálculo do espalhamento.....	56
Figura 15. Rotação de sistemas de coordenadas para o cálculo do espalhamento.	57
Figura 16. Distribuição das partículas de forma circular.....	59
Figura 17. Distribuição das partículas de forma elíptica.....	60
Figura 18. Algoritmo do MLPDA com o cálculo do efeito do vento inserido. Em destaque, a mudança inserida no algoritmo do MLPDA.	61
Figura 19. Baía hipotética de realização dos testes.	62
Figura 20. Comparação entre a teoria e a simulação do raio e da área da mancha de óleo para um volume de $1,5 m^3$ de óleo.	63
Figura 21. Comparação entre a teoria e a simulação do raio e da área da mancha de óleo após o ajuste da equação da área inicial circular.	64
Figura 22. Comparação entre a teoria e a simulação dos eixos da área elíptica da mancha de óleo para um volume de $1,5 m^3$ de óleo.	65
Figura 23. Comparação entre a teoria e a simulação da área da mancha de óleo para um volume de $10 m^3$ de óleo.....	66
Figura 24. Comparação entre a teoria e a simulação da área da mancha de óleo para um volume de $50 m^3$ de óleo.	67
Figura 25. Comparação entre a teoria e a simulação da área da mancha de óleo para um volume de $100 m^3$ de óleo.....	67
Figura 26. Evolução do espalhamento de 50 mil partículas sem vento atuante na mancha de óleo para um volume de $1,5 m^3$ de óleo.	69
Figura 27. Evolução do espalhamento de 50 mil partículas com um vento de 1 m/s atuante na mancha de óleo para um volume de $1,5 m^3$ de óleo.	70
Figura 28. Progressão da razão entre ΔQ e Q com o tempo de simulação.	71

Figura 29. Progressão da razão entre ΔR e R com o tempo de simulação.....	72
Figura 30. Área da mancha de óleo para diferentes tamanhos de malhas computacionais.....	73
Figura 31. Representação do complexo estuarino na região da Grande Vitória. Em destaque (retângulo vermelho) a área de estudo.....	74
Figura 32. Mapa batimétrico da região da Baía do Espírito Santo. Origem dos dados: Labesul (2002).	75
Figura 33. Representação da malha computacional de espaçamento 25 m x 25 m e as localizações dos contornos abertos utilizada no teste.....	76
Figura 34. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para a Baía do Espírito Santo.	76
Figura 35. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para o porto de Tubarão.	77
Figura 36. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para o canal da Passagem e entorno da ilha do Frade.	77
Figura 37. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para o canal de Acesso aos Portos.	78
Figura 38. Localização do ponto de lançamento do óleo das partículas no porto de Tubarão.	79
Figura 39. Divisão em setores da Baía do Espírito Santo.	80
Figura 40. Cenário um: instantes 1, 3, 5 e 7 horas após o derrame na área de estudo.	81
Figura 41. Cenário um: instantes 10, 20, 30, 40, 50 e 60 horas após o derrame na área de estudo.....	82
Figura 42. Cenário dois: instantes 1, 3, 7, 10 e 20 horas após o derrame na área de estudo....	84
Figura 43. Cenário dois: instantes 30 e 50 horas após o derrame na área de estudo.....	85
Figura 44. Cenário três: instantes 1, 3, 5 e 7 horas após o derrame na área de estudo.....	86
Figura 45. Cenário três: instantes 10, 15, 20 e 30 horas após o derrame na área de estudo.....	87

LISTA DE SÍMBOLOS

A_E - constante empírica

a_i - coeficiente de deriva

A_0 - área inicial da mancha de óleo

A_s - área da mancha de óleo

B_E - constante empírica

b_{ij} - coeficiente de difusão

C - concentração média do poluente

C_c - coeficiente de rugosidade de Chezy

C_{col} - concentração de partículas de óleo na coluna da água

C_e - coeficiente de viscosidade turbulento

$C_{f,ar}$ - coeficiente de arrasto do ar

$C_{f,água}$ - coeficiente de arrasto da água

$c_{óleo}$ - parâmetro experimental

C_{sed} - concentração de sedimentos na coluna da água

C_w - coeficiente de resistência do ar/fluido

c_1, c_2 - constantes empíricas

D_{ba} - energia de dissipação das ondas por unidades de área

D_{iss} - dissolução do óleo derramado

d_0 - diâmetro das partículas de óleo

$D_{xx}, D_{xy}, D_{yx}, D_{yy}$ - coeficientes de dispersão-difusão

E - taxa de energia dissipada da superfície da água

f - parâmetro de Coriolis

f_d - fração de superfície da partícula de óleo coberta por água

f_s - fração de superfície da água coberta por óleo

F_v - fração volumétrica de óleo evaporado

F_{WC} - fração de superfície de mar atingida pela rebentação das ondas

g - aceleração gravitacional

H - profundidade total da água

h - coordenada do centro da elipse

h_k - comprimento da banda do *kernel*

h_o - espessura da mancha de óleo

K - forma do *kernel*

k - coordenada do centro da elipse

K_a - parâmetro de adesão

K_{diss} - coeficiente de transferência de massa por dissolução

k_l - constante adimensional de dispersão longitudinal

K_M - constante empírica

k_t - constante adimensional de difusão turbulenta lateral

k_1, k_2 - constantes empíricas

L - comprimento da mancha de óleo para um espalhamento unidimensional

m_d - massa de óleo dispersada para coluna de água devida à rebentação das ondas

$m_{\text{óleo}}$ - massa de óleo que permanece na superfície da água

m_{sed} - massa de óleo sedimentado

n - número de partículas

p - descarga por unidade de largura na direção x

P - função de probabilidade

P_E - função de probabilidade euleriana

P_L - função de probabilidade lagrangiana

Q - eixo menor da elipse da mancha de óleo

q - descarga por unidade de largura na direção y

q_m - descarga-fonte por unidade de área horizontal

Q_v - coeficiente de transferência de massa

R - eixo maior da elipse da mancha de óleo

R_m - raio da mancha de óleo

R_0 - raio inicial da mancha de óleo

S - solubilidade do óleo na água

T - temperatura do óleo

t - tempo após o derrame

T_G - gradiente de curva de destilação

T_0 - ponto de ebulição inicial do óleo

t_0 - tempo de transição entre as fases inercial-gravitacional e gravitacional-viscosa

U - componente da velocidade média da água na profundidade na direção x

U_{vento} - componente da velocidade do vento na direção x

V - componente da velocidade média da água na profundidade na direção y

V_{oleo} - volume do óleo derramado

V_{vento} - componente da velocidade do vento na direção y

W - velocidade do vento 10 metros da superfície d'água

W_x - componente da velocidade do vento na superfície na direção x

W_y - componente da velocidade do vento na superfície na direção y

W_z - velocidade do vento medido a altura z

z_i - profundidade de intrusão das partículas de óleo na coluna de água devido à rebentação das ondas

β - fator de correção do momentum

β_w - constante empírica

η - elevação da superfície da água

ε - viscosidade turbulenta média na profundidade

ζ_x, ζ_y - números aleatórios

θ - ângulo elíptico da mancha de óleo

θ_D - ângulo de deflexão do movimento do óleo com relação ao vento

μ - viscosidade dinâmica do óleo

ν - viscosidade cinemática da água do mar

ρ_o - massa específica do óleo

ρ_a - massa específica do ar

ρ - massa específica da água

σ_n - tensão interfacial óleo-água

α - ângulo entre o sistema de coordenadas

α_w - constante empírica

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ - constantes empíricas adimensionais

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

Δd - intervalo de diâmetros das partículas

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
2	OBJETIVOS	21
2.1	OBJETIVO GERAL	21
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	21
3	OS MODELOS COMPUTACIONAIS	22
3.1	INTRODUÇÃO.....	22
3.2	O MODELO HIDRODINÂMICO.....	24
3.3	O MODELO LAGRANGIANO DE PARTÍCULAS	27
3.3.1	<i>Hipóteses assumidas no MLPDA</i>	30
3.3.2	<i>Equação discretizada do MLPDA</i>	30
3.3.3	<i>Condição de contorno</i>	31
3.3.4	<i>Algoritmo do modelo MLPDA</i>	32
3.3.5	<i>Os métodos de cálculo de concentração</i>	33
3.3.6	<i>O método de cálculo da área</i>	34
4	PROCESSOS ATUANTES NA MANCHA DE ÓLEO	36
4.1	ADVECÇÃO.....	37
4.2	ESPALHAMENTO.....	39
4.3	EVAPORAÇÃO.....	44
4.4	DISSOLUÇÃO	47
4.5	DISPERSÃO VERTICAL.....	48
4.6	SEDIMENTAÇÃO	49
4.7	OXIDAÇÃO	50
5	APRIMORAMENTO DO MODELO LAGRANGIANO DE PARTÍCULAS (MLPDA)	51
5.1	ADVECÇÃO DEVIDO AO VENTO	51
5.1.1	<i>Introdução no modelo lagrangiano</i>	51
5.1.2	<i>Inserção no algoritmo do MLPDA</i>	52
5.1.3	<i>Testes realizados</i>	53
5.2	PROCESSO FÍSICO DE ESPALHAMENTO	54
5.2.1	<i>Introdução do processo físico no modelo lagrangiano</i>	54
5.2.2	<i>Área inicial da mancha de óleo</i>	58
5.2.3	<i>Inserção no algoritmo do MLPDA</i>	61
5.2.4	<i>Testes realizados para o algoritmo do espalhamento</i>	62
5.2.5	<i>Testes realizados do algoritmo de cálculo de área</i>	72

6	 APLICACÃO DE UM DERRAME HIPOTÉTICO DE ÓLEO NA BAÍA DO ESPÍRITO SANTO	74
6.1	ÁREA DE ESTUDO.....	74
6.2	MODELAGEM HIDRODINÂMICA.....	75
6.3	MODELAGEM DO DERRAME DE ÓLEO	78
6.3.1	<i>Cenário um</i>	81
6.3.2	<i>Cenário dois</i>	83
6.3.3	<i>Cenário três</i>	86
6.3.4	<i>Resumo dos cenários</i>	89
7	 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	90
8	 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	91

1 INTRODUÇÃO

Os ecossistemas mundiais, em suas diferentes formas, têm sido degradados devido às atividades praticadas pelo homem. Os ambientes aquáticos (dulcícolas, salobros e marinhos) não são exceções, sendo afetados por lançamentos de efluentes domésticos e industriais e derramamentos acidentais de contaminantes.

Dentre os derrames de contaminantes em ambientes aquáticos, podem-se apontar os derramamentos de petróleo em zonas costeiras como um dos mais importantes, visto seu grande impacto ambiental e sócio-econômico, uma vez que cerca de 60% da população mundial vive em um raio de até 60 km da orla litorânea e estima-se que essa proporção aumente para 75% em 2025 (AGENDA 21, 1992).

Os derramamentos de petróleo e derivados ocorrem nos pontos de extração, na fuga dos oleodutos, por acidentes de embarcações de transporte ou nas refinarias (SOTO, 2004). Apesar dos derramamentos acidentais de petróleo representarem 5% do total da poluição mundial, eles têm um grande impacto sobre a estrutura social, econômica e ecológica na área afetada, principalmente em regiões de grande sensibilidade ao óleo, podendo causar verdadeiros desastres ambientais. Por esta razão, a previsão da evolução do óleo derramado é essencial para um adequado plano de manejo para este tipo de evento na zona costeira (JANEIRO *et al.*, 2008). As conseqüências adversas que surgem com derrames, motivam desde logo uma preocupação no que diz respeito não só à monitoramento e acompanhamento da situação, mas também na capacidade de prever eficazmente o comportamento do óleo derramado nas horas seguintes.

O transporte e intemperismo do óleo derramado são governados por processos físico-químicos e biológicos complexos que dependem das propriedades do óleo, condições hidrodinâmicas e ambientais (WANG *et al.*, 2005; JANEIRO *et al.*, 2008; WANG *et al.*, 2008). Os processos incluem advecção, difusão turbulenta, espalhamento, evaporação, dissolução, emulsificação, sedimentação e a interação da mancha de óleo com a linha de costa. A complexidade destes processos faz com que os modelos numéricos sejam ferramentas importantes para solucionar as interações que ocorrem em diferentes escalas de tempo (JANEIRO *et al.*, 2008).

Segundo Rosman (2001) e Fragoso Jr. *et al.* (2009), os modelos computacionais são utilizados para fins de previsão, entendimento dos processos e preenchimento das variáveis de interesse em um período sem levantamento. Modelos numéricos validados são ferramentas indispensáveis à gestão e ao gerenciamento de sistemas ambientais que, integrando informações de modo consistente, podem descrever de forma satisfatória a hidrodinâmica e processos de dispersão de constituintes (ROSMAN, 2001; AMARAL, 2003), quantificando de forma preditiva os impactos de um determinado distúrbio no ambiente, para que as medidas preventivas possam ser tomadas (FRAGOSO JR. *et al.*, 2009). O uso de modelos numéricos é uma ferramenta barata e de ampla aplicação para fins científicos e práticos que não é somente aplicada no transporte e difusão do óleo, como também para outros poluentes (ALVES, 2006).

De acordo com Spivakovskaya *et al.* (2007), os modelos computacionais hidrodinâmicos e de transporte de soluto podem ser do tipo euleriano (com base no referencial de Euler), do tipo lagrangianos (com base no referencial de Lagrange) ou do tipo euleriano-lagrangiano. Na abordagem euleriana, as variáveis do meio hidrodinâmico são analisadas simultaneamente em pontos fixos no espaço. Em contrapartida, a técnica lagrangiana identifica e acompanha uma parcela do fluido que se move com a velocidade do escoamento. Já os modelos do tipo euleriano-lagrangiano é uma combinação das duas abordagens levando em consideração as vantagens de cada técnica.

Destacando o método lagrangiano, este é baseado na representação do fluido por partículas discretas, sendo chamados de métodos de partículas, onde são medidas suas variáveis de estado ao longo de sua trajetória. Pereira (2004) menciona que, dentre as vantagens na utilização da abordagem lagrangiana, pode-se citar a simplicidade computacional e de se necessitar somente das propriedades estatísticas do meio.

Nas últimas três décadas, muitas pesquisas têm direcionado seus esforços ao desenvolvimento de modelos matemáticos para prever a dispersão do óleo derramado em ambientes marinhos (CERKIRGE & PALMER, 2001). Estes estudos focam vários processos físicos, químicos e biológicos ocorrentes nas manchas de óleo e, muitas vezes, se deparam com limitações da reprodução do fenômeno devido sua grande complexidade. No estado da arte atual, os modelos matemáticos que buscam reproduzir os processos que óleo sofre são aproximações feitas com base em estudos empíricos e experiência do comportamento do óleo (CERKIRGE & PALMER, 2001).

Em literaturas encontram-se muitos modelos de derramamento de óleo amplamente utilizados, como ADIOS e GNOME, além de alguns modelos comerciais, como o OILMAP e OSCAR, e de outros modelos sem nomeações. De acordo com Chao *et al.* (2001), alguns modelos de previsão de derrame de óleo tem uma visão limitada do entendimento dos processos do óleo derramado e que a precisão das simulações devem ser visto com certa restrição.

É neste contexto que se torna relevante o desenvolvimento de modelos de simulação de derrames de hidrocarbonetos capazes de fornecer resultados confiáveis e obter um conhecimento do comportamento de uma mancha de óleo em ambientes marinhos. Quando certo acidente acontece, há uma necessidade imediata para determinar como rapidamente o óleo irá espalhar e onde chegará dado um tempo determinado. E, uma vez tendo conhecimento sobre o comportamento da mancha de óleo, este dá suporte a decisões para que se providenciem as melhores medidas para mitigarem tal problema.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

- Desenvolver um modelo computacional lagrangiano de trajetória de mancha de óleo que considere o efeito do vento e o processo físico de espalhamento para estudo do comportamento de manchas de óleo em regiões marinhas costeiras.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Implementar e verificar o algoritmo de efeito do vento sobre manchas de óleo;
- Implementar e verificar o algoritmo de processo físico de espalhamento da mancha de óleo em ambiente marinho;
- Aplicar o modelo desenvolvido por meio da simulação de um derrame hipotético de óleo nas águas da Baía do Espírito Santo.

3 OS MODELOS COMPUTACIONAIS

3.1 INTRODUÇÃO

Um modelo, de forma geral, é a representação de algum objeto ou sistema em uma linguagem de fácil acesso e uso, com o objetivo de entendê-lo e buscar suas respostas perante diferentes entradas (FRAGOSO JR *et al.*, 2009). Liu & Liu (2003) sintetizam que modelos computacionais, através de modelos numéricos, traduzem aspectos de um problema físico em uma forma discreta da descrição matemática, recriam e solucionam o problema em um computador.

Cekirge & Palmer (2001) e Fragoso *et al.* (2009) afirmam que quanto maior número de interações envolvidas no fenômeno de interesse, mais complexos os sistemas e, conseqüentemente, mais desafiadores e necessários os modelos. Por isso a modelagem computacional tem cada vez mais se tornado uma importante abordagem para solução de problemas complexos em engenharia e ciência (LIU & LIU, 2003), face à complexidade do ambiente em corpos de água, especialmente em lagos, reservatórios, estuários e zona costeira (ROSMAN, 2001), além de atuar como uma ponte entre os modelos experimentais e as previsões teóricas. Inclusive, Liu & Liu (2003) argüem que um papel valioso em que a modelagem computacional desempenha é a validações de teorias, oferecendo maior conhecimento aos resultados experimentais e auxiliando na interpretação dos fenômenos de interesse.

Os modelos computacionais têm por característica ser uma ferramenta integradora, pois permitem integrar informações espacialmente dispersas, interpolar informações para regiões nas quais não há medições, ajudar a interpretação de medições feitas em estações pontuais, propiciar entendimento da dinâmica de processos e prever situações simulando cenários futuros (ROSMAN, 2001). O uso de modelos como ferramentas de previsão inclusive pode ser feito praticamente em tempo real, para planejar operações de limpeza ambiental em decorrência de derrames acidentais de contaminantes tóxicos, como óleos e solventes (ROSMAN, 2001).

Para uma modelagem matemática de um sistema ambiental ser de valor, ele deve de algum modo reproduzir os fenômenos associados com o sistema modelado, e deve considerar três

características gerais que definem a natureza essencial de um modelo ambiental: a escala de tempo do problema, a dinâmica geofísica do sistema e as reações cinéticas das substâncias a serem modeladas (CEKIRGE & PALMER, 2001).

Os modelos computacionais podem ser classificados de diferentes formas, em concordância com as equações que os governam. Quando as variáveis de estado ou suas mudanças são bem definidas, as relações entre as funções governantes e as variáveis de estado são fixadas e as saídas são únicas, então o modelo desse sistema é chamado de determinístico (FRAGOSO *et al.*, 2009). Porém, se alguma aleatoriedade ou probabilidade é associada com, no mínimo, uma das variáveis de saída do modelo, então o modelo é chamado de estocástico, o qual inclui características estatísticas (FRAGOSO *et al.*, 2009).

Outro tipo de classificação dos modelos diz respeito ao referencial adotado de suas equações governantes, em que pode ser classificado em euleriano (referencial de Euler) ou lagrangiano (referencial de Lagrange).

Na abordagem euleriana, o domínio espacial é discretizado por um conjunto de pontos que formam a malha computacional. As equações do transporte são solucionadas nesses pontos através de um conjunto de equações algébricas que se originam da discretização das equações diferenciais parciais por intermédio de métodos numéricos (SANTIAGO, 2007). Os métodos advindos da abordagem euleriana (métodos das diferenças finitas e elementos finitos) foram os primeiros a serem aplicados a modelagem de transporte e permanecem sendo bastante utilizados (SPIVAKOVSKAYA *et al.*, 2007).

Contudo, de acordo com Vasco *et al.* (2009), este tipo de método enfrenta limitação de representação de domínios de geometrias complexas, sendo necessário a aplicação de algumas técnicas como a reestruturação de malha ou malhas adaptativas. Já Spivakovskaya *et al.* (2007) e Charles *et al.* (2009) apontam que o método euleriano possui dificuldade em solucionar fortes gradientes de concentração quando utiliza a equação de advecção-difusão para simular dispersão de poluentes, podendo ocorrer difusão numérica e oscilações artificiais.

Já na abordagem lagrangiana, partículas individuais do fluido são seguidas através do espaço em cada passo de tempo e traça-se a trajetória de cada uma (WOLK, 2003; SPIVAKOVSKAYA *et al.*, 2007). Fernandes (2001) expõe que os primeiros modelos lagrangianos utilizavam o conceito de traçador para seguir a respectiva trajetória e, deste

modo, perceber de uma forma intuitiva os mecanismos de transporte. Nestes, as propriedades básicas de cada traçador eram apenas a origem e a posição espacial. Posteriormente surgiram versões mais sofisticadas, que tinham como principal objetivo o estudo do impacto em ecossistemas aquáticos de emissões pontuais antropogênicas (FERNANDES, 2001).

Os métodos lagrangianos provêm uma solução precisa e eficiente a problemas dominados por advecção, essencialmente pela eliminação de efeitos de difusão numérica e oscilações artificiais (SPIVAKOVSKAYA *et al.*, 2007), além de não esbarrar no problema de discretização do domínio como acontece com os métodos eulerianos. Em contrapartida, modelos lagrangianos também podem apresentar problemas, como interpolações errôneas de variáveis do escoamento, além de esforço computacional elevado quando se considera um alto número de partículas.

O aumento exponencial da capacidade de cálculo dos computadores que se tem verificado nos últimos anos veio permitir que os modelos lagrangianos venham a ser utilizados para simular processos cada vez mais complexos, como espalhamento de manchas de óleo em regiões costeiras (GAZE, 2009).

3.2 O MODELO HIDRODINÂMICO

O modelo computacional hidrodinâmico utilizado neste estudo foi o DIVAST (*Depth Integrated Velocity and Solute Transport*), o qual se baseia nas equações do tipo águas rasas, que são resultado da integração na vertical das equações tridimensionais de Reynolds considerando um fluido incompressível e as hipóteses de pressão hidrostática e de onda longa. O DIVAST é um modelo euleriano 2DH, isto é, um modelo bidirecional na horizontal, sendo este tipo de modelo usado para corpos d'água bem misturados a pouco estratificados.

As equações que governam o modelo são as de conservação da massa e quantidade de movimento. Quando estas são integradas na profundidade, assumem as formas mostradas a seguir (Equações 1, 2 e 3) (FALCONER, 1976).

Conservação de massa:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial y} = q_m \quad (1)$$

Conservação da quantidade de movimento:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \beta p U}{\partial x} + \frac{\partial \beta p V}{\partial y} = f q - g H \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\rho_a}{\rho} C_w W_x \sqrt{W_x^2 + W_y^2} \\ - \frac{g p \sqrt{p^2 + q^2}}{H^2 C_c^2} + \varepsilon \left(2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial x \partial y} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial \beta p U}{\partial x} + \frac{\partial \beta p V}{\partial y} = -f p - g H \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\rho_a}{\rho} C_w W_y \sqrt{W_x^2 + W_y^2} \\ - \frac{g q \sqrt{p^2 + q^2}}{H^2 C_c^2} + \varepsilon \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial y} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

Onde: p e q são descargas por unidade de largura ($\text{m}^3/\text{s}/\text{m}^2$) nas direções x e y , respectivamente; q_m é a descarga-fonte por unidade de área horizontal ($\text{m}^3/\text{s}/\text{m}^2$); U e V são componentes da velocidade média na profundidade nas direções x e y , respectivamente (m/s); β é o fator de correção do momentum (adimensional); f é o parâmetro de Coriolis devido à rotação da Terra (s^{-1}); g é a aceleração gravitacional; H é a profundidade total da água (m); η é a elevação da superfície da água (m); ρ_a é a massa específica do ar (kg/m^3); ρ é a massa específica do fluido (kg/m^3); C_c é o coeficiente de rugosidade de Chezy ($\text{m}^{1/2}/\text{s}$); C_w é o coeficiente de resistência do ar/fluido (m^2/s); ε é a viscosidade turbulenta média na profundidade (m^2/s); W_x e W_y são componentes da velocidade do vento na superfície nas direções x e y , respectivamente, medida a 10 metros de altura (m/s);

O coeficiente ε é parametrizado utilizando-se um modelo de turbulência simplificado, em que o coeficiente é expresso por apenas uma equação algébrica, o chamado Comprimento de Mistura de Prandtl (FALCONER, 1976). Tal modelo simula apenas a turbulência gerada pela fricção de fundo, desconsiderando a gerada pelo cisalhamento interno. Essa aproximação é válida para áreas rasas e bem misturadas. O Comprimento de Mistura de Prandtl possui a vantagem de requerer baixos esforços computacionais, ao contrário de modelos de turbulência mais complexos. A equação algébrica utilizada nesse modelo de turbulência é:

$$\varepsilon = C_e \frac{H}{C_c} \sqrt{g(U^2 + V^2)} \quad (4)$$

onde C_e representa um coeficiente de viscosidade turbulento oriundo de dados experimentais e de valor aproximado de 0,15.

Os coeficientes de dispersão-difusão são definidos como (FALCONER, 1976):

$$D_{xx} = \frac{(k_l p^2 + k_t q^2) \sqrt{g}}{C \sqrt{p^2 + q^2}} \quad (5)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = \frac{(k_l - k_t) pq \sqrt{g}}{C \sqrt{p^2 + q^2}} \quad (6)$$

$$D_{yy} = \frac{(k_l q^2 + k_t p^2) \sqrt{g}}{C \sqrt{p^2 + q^2}} \quad (7)$$

Nos quais k_l é a constante adimensional de dispersão longitudinal e k_t a constante adimensional de difusão turbulenta lateral que assumem, respectivamente, valores de 5,93 e 0,23.

O método utilizado pelo modelo para resolver as equações governantes descritas anteriormente é o método das diferenças finitas. As equações diferenciais parciais são substituídas por expressões de diferenças finitas em uma malha computacional. As expressões em diferenças finitas são baseadas na aproximação em séries de Taylor, dessa forma o domínio contínuo do problema é substituído por um domínio discreto (FALCONER, 1976).

O tipo de esquema é baseado no método Implícito de Direção Alternante (*Alternating Direction Implicit – ADI*). Esta técnica envolve a subdivisão de cada passo de tempo em dois meio passos de tempo. No primeiro meio passo de tempo a elevação da água e a componente U da velocidade são solucionadas implicitamente na direção ‘x’, enquanto que as outras variáveis são representadas explicitamente. Para o segundo meio passo de tempo, a elevação da água e a componente V são solucionadas implicitamente na direção ‘y’, com as outras variáveis sendo representadas explicitamente (FALCONER, 1976).

A elevação é avaliada no centro da célula da malha computacional; a velocidade no centro dos lados da célula, nas direções x e y; e as profundidades são especificadas no centro de cada lado da célula (Figura 1).

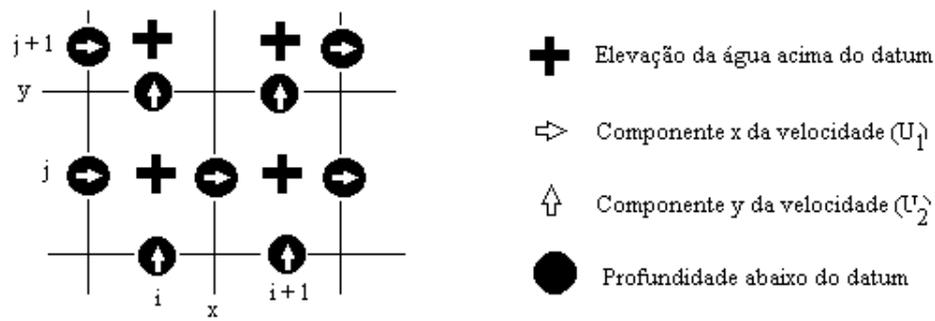


Figura 1. Localização dos pontos de cálculo das variáveis na malha computacional.

3.3 O MODELO LAGRANGIANO DE PARTÍCULAS

O modelo lagrangiano de partículas utilizado neste estudo MLPDA (Modelo Lagrangiano de Partículas de Deslocamento Aleatório) foi desenvolvido por Santiago (2007), o qual adaptou o modelo para estudos hidrodinâmicos. O MLPDA simula um dado poluente como um número discreto de partículas inertes e passivas. Seu princípio é a equação de Langevin (RODEAN, 1994):

$$dx_i = a_i(x_i, t)dt + b_{ij}(x_i, t)dW_j(t) \quad (8)$$

onde $a_i(x_i, t)dt$ é o termo determinístico dado pelas propriedades estatísticas do escoamento; $b_{ij}(x_i, t)dW_j(t)$ é o termo estocástico, onde $dW_j(t) = \xi_j dt$ é um processo incremental de Wiener, sendo contínuo, gaussiano e markoviano. Os coeficientes a_i e b_{ij} são, respectivamente, os coeficientes de deriva e difusão.

De acordo com Rodean (1994), existe uma equação (euleriana) equivalente à equação de Langevin (lagrangiana): a equação de Fokker-Planck. Essa equação cada vez mais vem sendo utilizada como um complemento à equação de Langevin na modelagem da difusão turbulenta (Spivakovskaya *et al.*, 2007B).

A equação de Fokker-Planck associada a equação 8 e que é uma equação euleriana que descreve o mesmo processo estocástico markoviano da equação de Langevin (RODEAN, 1994; PEREIRA, 2004) é dada por:

$$\frac{\partial P_E}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{2} b_{ij} b_{jk} P_E \right) \quad (9)$$

Onde P_E é a função de probabilidade euleriana, $a_i = a_i(x, t)$ e $b_{ij} = b_{ij}(x, t)$.

Para determinar o termo a_i da equação 8, é necessário impor a condição de boa mistura. Esta hipótese enuncia que as trajetórias das partículas do soluto, inicialmente bem misturadas em um escoamento, devem assim permanecer. Portanto, as partículas têm que ter os mesmos momentos estatísticos da posição e velocidade e as mesmas covariâncias do escoamento. Pela equação de transporte de soluto, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(CH)}{\partial t} + \frac{\partial(UCH)}{\partial x} + \frac{\partial(VCH)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + HD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} + HD_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

onde $C(x, y, t)$ é a concentração média, U e V são as velocidades médias nas direções x e y , respectivamente, H é a profundidade da coluna aferida desde a superfície da água até o leito e $D_{xx}(x, y, t)$, $D_{yy}(x, y, t)$, $D_{xy}(x, y, t)$ e $D_{yx}(x, y, t)$ são os coeficientes de dispersão-difusão.

Pode-se reescrever a equação de transporte de solutos conforme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(CH)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{D_{xx}}{H} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{D_{xy}}{H} \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y} + U \right) CH \right] \\ - \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{D_{yy}}{H} \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} + \frac{D_{yx}}{H} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + V \right) CH \right] \\ + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (D_{xx} CH) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (D_{yy} CH) + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (D_{xy} CH) + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (D_{yx} CH) \end{aligned} \quad (11)$$

A equação 11 equivale a equação 9 (TOMÉ & OLIVEIRA, 2001); comparando-se os seus termos, encontra-se uma expressão para a_i :

$$a_i = \left[\begin{array}{l} \frac{D_{xx}}{H} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{D_{xy}}{H} \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y} + U \\ \frac{D_{yy}}{H} \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} + \frac{D_{yx}}{H} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + V \end{array} \right]; \quad (12)$$

Observando que:

$$P_E = P_L = P = CH \quad (13)$$

e:

$$\frac{1}{2} \mathbf{B}\mathbf{B}^T = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} \quad (14)$$

Considerando o escoamento alinhado com o sistema coordenado ou, reciprocamente, o sistema coordenado alinhado ao escoamento, os termos cruzados da matriz podem ser desprezados, de modo que a equação 14 torna-se:

$$\frac{1}{2} \mathbf{B}\mathbf{B}^T = \begin{bmatrix} D_{xx} & 0 \\ 0 & D_{yy} \end{bmatrix} \quad (15)$$

A condição de boa mistura permite ao MLPDA utilizar-se das propriedades estatísticas eulerianas do escoamento para calcularem as trajetórias das partículas (RODI, 1993).

Substituindo as equações 12 e 14 na equação 8, obtém-se:

$$\begin{aligned} dx &= \left[U + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} (D_{xx} H) \right] dt + \sqrt{2D_{xx}} dW_x(t) \\ dy &= \left[V + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} (D_{yy} H) \right] dt + \sqrt{2D_{yy}} dW_y(t) \end{aligned} \quad (16)$$

As equações de deslocamento aleatório (equação 16) são escritas em função dos coeficientes de difusão (D_{xx} e D_{yy}) e das variáveis hidrodinâmicas (H , U e V). Comumente, as variáveis hidrodinâmicas são calculadas a partir de um modelo euleriano.

3.3.1 Hipóteses assumidas no MLPDA

Para se determinar os coeficientes a_i e b_{ij} da equação de Langevin (equação 8), hipóteses e restrições devem ser assumidas em termos das propriedades estatísticas conhecidas da velocidade do escoamento. As hipóteses assumidas são (PEREIRA, 2004):

- As partículas são consideradas inertes, não sendo removidas nem depositadas ao longo de suas trajetórias;
- Partículas consideradas passivas, possuindo o mesmo comportamento de um elemento de fluido no escoamento (condição de boa mistura);
- A difusão molecular é desprezível em comparação com a difusão turbulenta;
- A turbulência é homogênea e estacionária no caso da equação de Langevin do tipo linear-gaussiana, que é o caso do modelo utilizado nesse trabalho.

3.3.2 Equação discretizada do MLPDA

A demonstração dos procedimentos adotados para discretizar a equação 16 é suprimida neste trabalho. Para maiores detalhes ver trabalhos de Pereira (2004), Santiago (2007) e Gaze (2009).

A equação resultante da discretização da equação 16 é:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \left[U_{cor} + \frac{\Delta D_{xx}}{H} \frac{\Delta H}{\Delta x} + \frac{\Delta D_{xx}}{\Delta x} \right] \Delta t + \sqrt{2D_{xx}} \zeta_{x_n} \Delta t \\ y_{n+1} &= y_n + \left[V_{cor} + \frac{\Delta D_{yy}}{H} \frac{\Delta H}{\Delta y} + \frac{\Delta D_{yy}}{\Delta y} \right] \Delta t + \sqrt{2D_{yy}} \zeta_{y_n} \Delta t \end{aligned} \quad (17)$$

O modelo DIVAST fornece o campo de velocidade média, a profundidade e os coeficientes de difusão ao modelo lagrangiano. Já os números aleatórios ζ_x e ζ_y são determinados por algoritmos geradores de números pseudo-aleatórios que fornecem seqüências numéricas distribuídas aleatoriamente em intervalos conhecidos. O modelo desse estudo faz uso, para a geração desses números, algoritmo mais comumente usado encontrado na literatura: o

GASDEV do *Numerical Recipes* (PRESS *et al.*, 1992 *apud* GAZE, 2009), cuja rotina gera números aleatórios com distribuição gaussiana, de média zero e variância unitária.

3.3.3 Condição de contorno

Existem fundamentalmente dois tipos de condições de contorno para modelos de transporte lagrangiano. Essas condições são do tipo absorção ou do tipo reflexão.

O MLPDA admite estes dois tipos distintos de condições de contorno. A primeira delas, a condição de absorção, assume contornos permeáveis, de maneira que se uma partícula atinge a terra ou sai do domínio computacional, automaticamente desaparece dos cálculos computacionais ulteriores. Essa condição permite uma gradual perda da massa total no interior do domínio.

A segunda condição é de reflexão perfeita. Nesse caso a partícula que ultrapasse a terra, é realizada um cálculo que lhe conceda uma nova posição dentro do modelo computacional (Figura 2).

O modelo distingue, no domínio simulado, a parte composta por água e a por terra através de uma malha utilizada no DIVAST formada por um código binário no qual cada célula é representada por um algarismo, sendo 0 (zero) para célula da malha em terra e 1 (um) para célula da malha em água.

A cada passo de tempo de simulação do MLPDA, a posição de cada partícula está associada ao código binário correspondente à célula na qual ocupa. Sendo a célula zero (terra), a partícula será absorvida ou refletida, dependendo dos parâmetros estabelecidos. Sempre que uma partícula sai do domínio computacional por uma de suas fronteiras abertas, ocorre a condição de absorção.

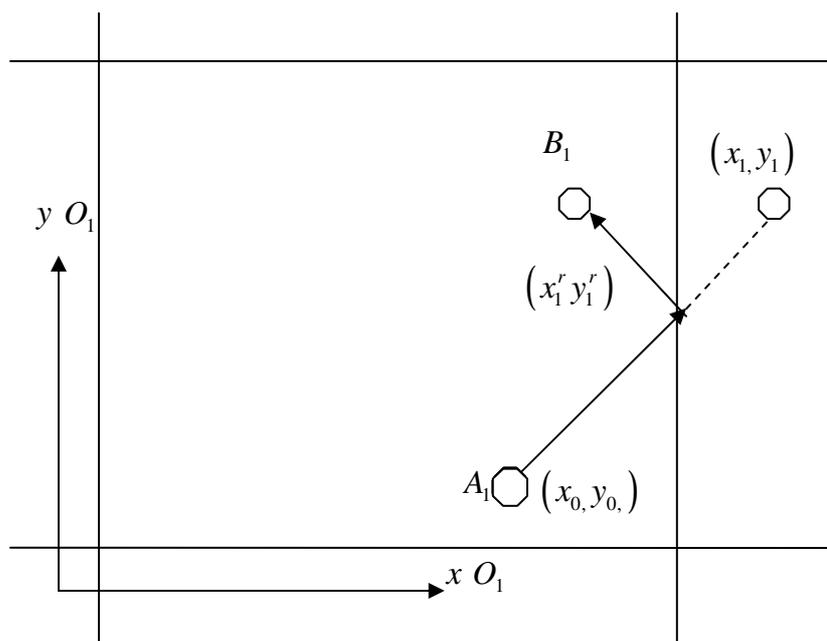


Figura 2. Representação da reflexão de uma partícula no modelo de transporte. Fonte: Santiago, 2007.

3.3.4 Algoritmo do modelo MLPDA

O código computacional do MLPDA foi desenvolvido por Pereira (2004) para estudo de dispersão de poluente atmosférico, e posteriormente adaptado por Santiago (2007) no estudo de dispersão de partículas no Canal de Acesso ao Porto de Vitória (Vitória-ES).

A Figura 3 aponta o fluxograma que sintetiza as etapas percorridas pelo MLPDA no cálculo das posições das partículas e concentração pelo método *box* (Capítulo 4) de contagem de partículas:

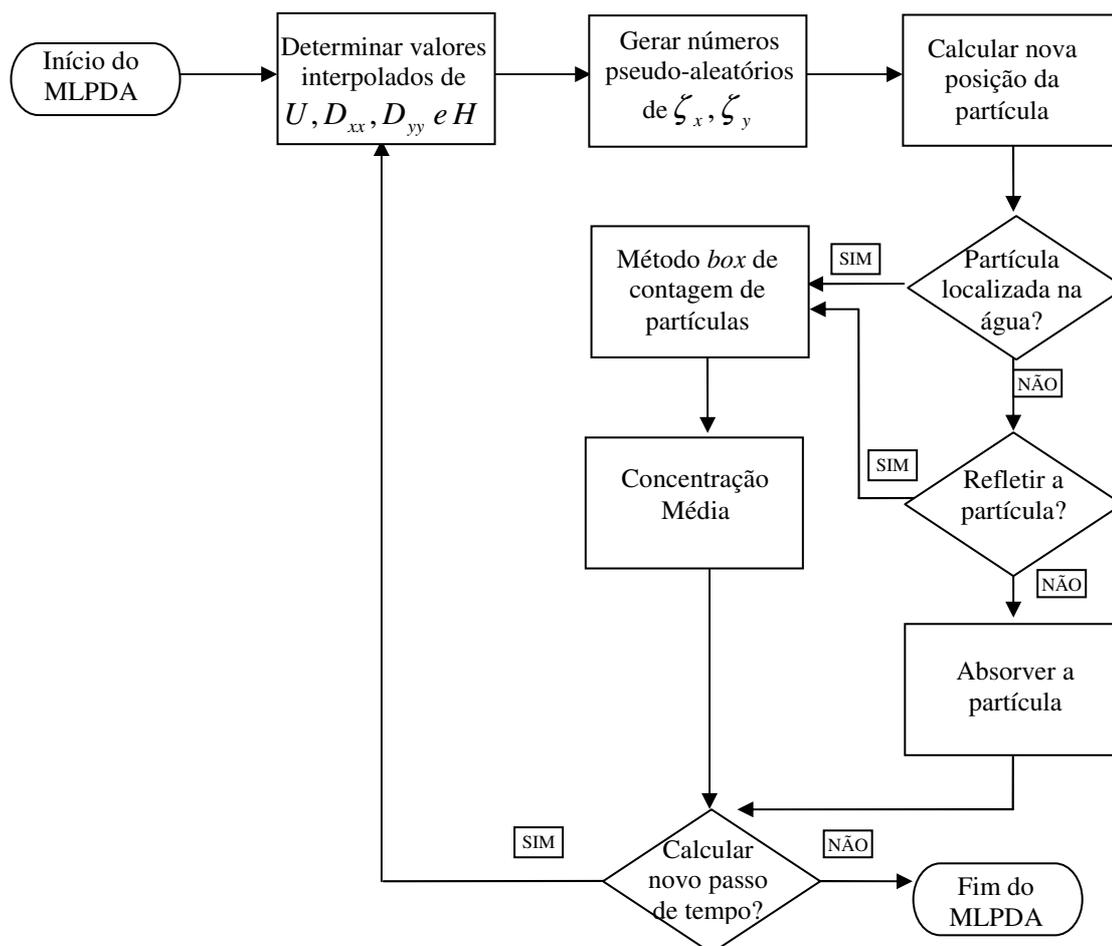


Figura 3. Fluxograma com as etapas do MLPDA para o cálculo das posições das partículas e concentração média pelo método *box*.

3.3.5 Os métodos de cálculo de concentração

Em modelos lagrangianos de dispersão de poluentes é importante construir uma estimativa da concentração do poluente transportado no ambiente de estudo. Para esse fim, duas vertentes metodológicas são abordadas no MLPDA: o método *box* de contagem de partículas e o método *kernel* de densidade.

O método *box* consiste na contagem de todas as partículas em uma célula da malha no espaço. A estimativa da concentração é, então, obtida multiplicando-se o número de partículas pelo valor de suas massas e dividindo essa massa total pelo volume do *box*. De acordo com Gaze (2009), este método de contagem de partículas dentro de um *box* é idêntico ao realizado no cálculo de um histograma tridimensional.

No o método *kernel*, cada partícula gera uma distribuição de massa ao longo do domínio físico. O valor da concentração, num ponto qualquer, terá a contribuição de todas as partículas que se encontrem no domínio físico. Segundo Vitali *et al.* (2006) *apud* Gaze (2009), o perfil de densidade é dado pela função *kernel*, enquanto que a quantidade de massa “espalhada” depende do comprimento de banda (*bandwidth*) associado a cada partícula.

Esse último método tem sido a ferramenta de estimativa de densidade cada vez mais em uso nos modelos lagrangianos de partículas, sejam eles de dispersão de poluentes na atmosfera, ou em corpos hídricos, visto suas vantagens frente ao método *box* (GAZE, 2009).

Nesse método *kernel*, cada partícula gera uma distribuição de massa ao longo do domínio. A concentração, em qualquer ponto, é o somatório dessas contribuições:

$$C(x) = \frac{1}{nh_k} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x-x_i}{h_k}\right) \quad (18)$$

Sendo h e K , respectivamente, o comprimento da banda e a forma do *kernel*, n e x_i , concomitantemente, o número de partículas e suas posições.

Seis formas para k foram implementadas por Gaze (2009): a clássica *gaussiana*, *Epanechnikov* e as *biweight*, *triweight*, *quadweight* e *quintweight*. A equação clássica gaussiana é:

$$K_G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} r^T r\right) \quad (19)$$

em que d é o número de dimensões consideradas, no caso bidimensional, $d = 2$.

3.3.6 O método de cálculo da área

O modelo lagrangiano calcula a área da mancha de óleo usando sem perda da generalidade as células da malha do modelo DIVAST. As células que contém ao menos uma partícula são contabilizadas como área da mancha. A Figura 4 esquematiza a forma de cálculo.

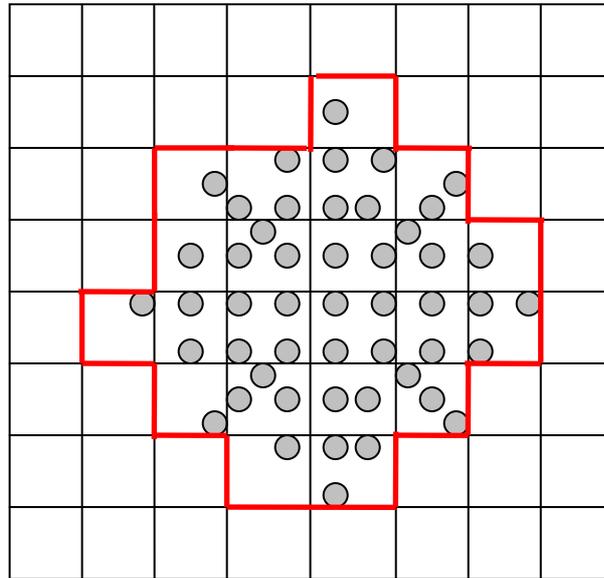


Figura 4. Exemplo do esquema de cálculo da área da mancha de óleo no MLPDA. Área em vermelho seria contabilizada neste exemplo.

4 PROCESSOS ATUANTES NA MANCHA DE ÓLEO

O óleo quando entra em contato com o ambiente marinho sofre uma variedade de transformações físicas, químicas e biológicas além do seu transporte no ambiente (Figura 5). Imediatamente após a introdução do petróleo no oceano, a advecção e espalhamento fazem com que haja um rápido aumento na área exposta do óleo, que posteriormente passará por processos de intemperismo incluindo a evaporação, dissolução, dispersão, emulsificação e sedimentação. Em cada um destes processos estão envolvidos os fatores químicos, determinados pela composição específica de petróleo derramado, bem como a oxidação fotoquímica que alguns componentes do petróleo podem sofrer.

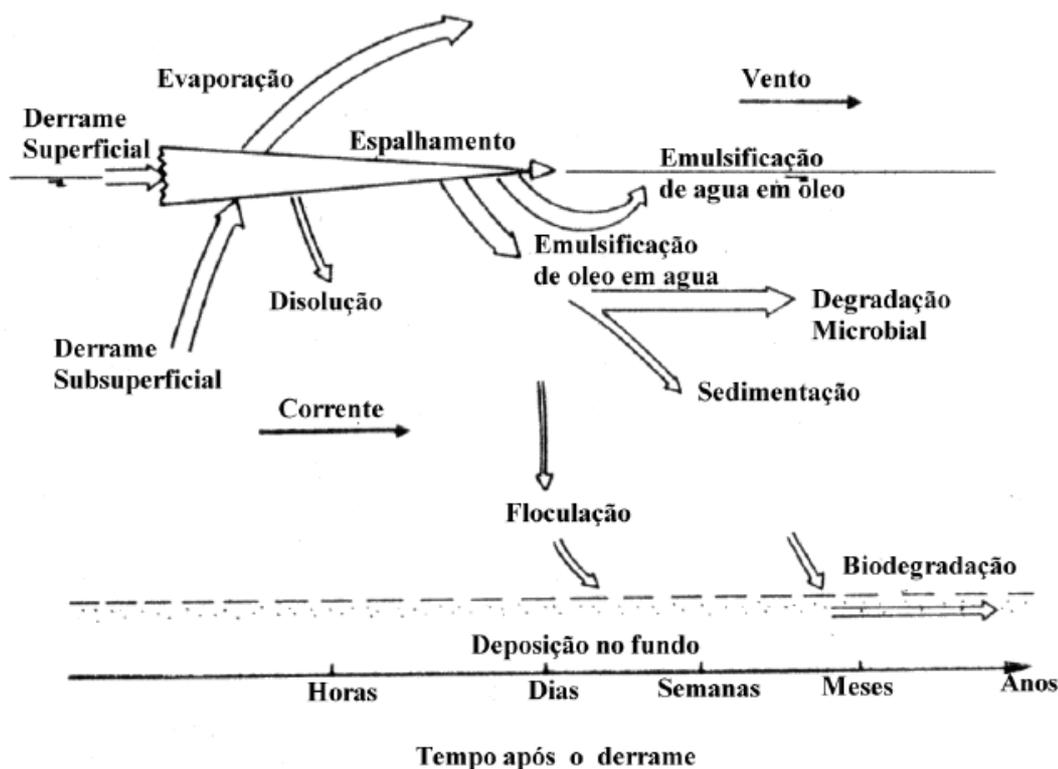


Figura 5. Processos que ocorrem óleo derramado de acordo com o tempo. Fonte: Paladino, 2000.

A Figura 6 mostra mais claramente a escala de tempos em que os diferentes fenômenos possuem maior importância. Deve-se deixar claro que as escalas de tempos em que os fenômenos acontecem dependem do volume derramado (PALADINO, 2000).

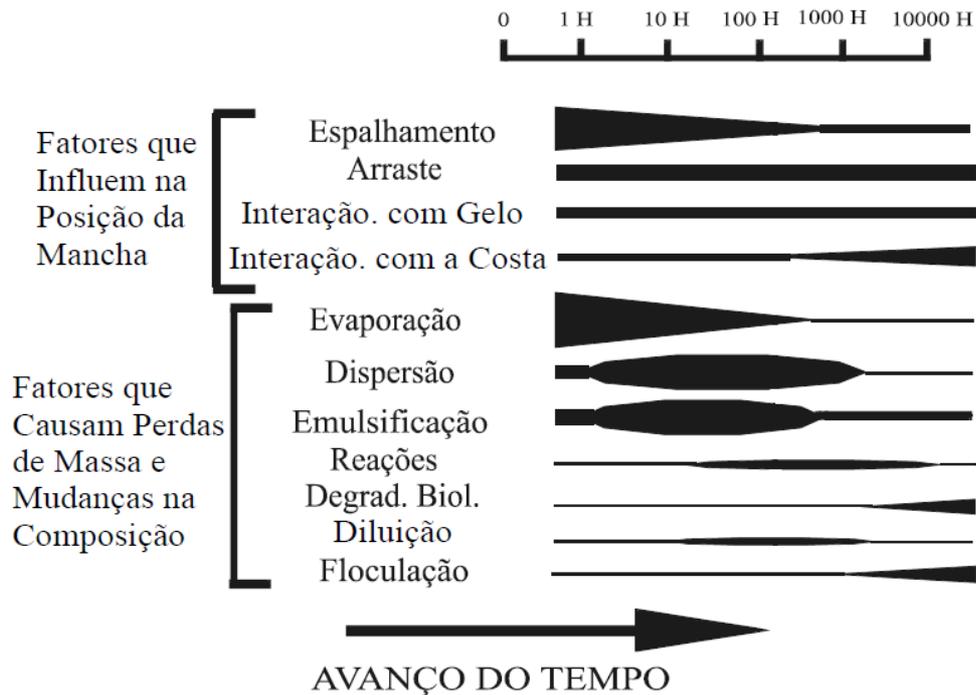


Figura 6. Relevância dos processos que ocorrem óleo derramado de acordo com o tempo. Fonte: Paladino, 2000.

4.1 ADVECCÃO

A advecção consiste em um processo de transporte da mancha de óleo por correntes marítimas, ondas e vento. Trata-se de um processo físico relacionado à deriva da mancha de óleo na superfície e abaixo dela. É o principal mecanismo que determina o deslocamento do óleo ao longo do tempo, correspondendo à soma vetorial dos componentes de transporte decorrentes da ação de correntes e de ventos sobre a mancha (CEKIRGE & PALMER, 2001).

O conhecimento das correntes superficiais quanto na coluna d'água se torna importante no entendimento do comportamento de manchas de óleo, uma vez que o óleo também é transportado verticalmente na coluna d'água na forma de pequenas bolhas (*"droplets"*) de tamanhos variados (ASCE, 1996).

Os modelos de derramamento de óleo utilizam constantes ou parâmetros variáveis para relacionar velocidade da corrente e do vento à velocidade superficial da mancha de óleo, conhecido como fator de deriva. Na maior parte dos modelos de transporte de óleo, o fator de deriva devido a correntes superficiais assume o valor de 1 (um).

Já o fator de deriva do vento, em muitos estudos (WANG *et al.*, 2005; JANEIRO *et al.*, 2008; GUO & WANG, 2009; GUO *et al.*, 2009) consideram que 3% da velocidade do vento é transmitida a velocidade da mancha de óleo. Segundo Chen *et al.* (2007), o fator de deriva do vento pode variar entre 2.8 e 4.2% com base em experimentos de laboratório, enquanto que observações de campo esse fator varia entre 3.5% e 5.2%. No estudo conduzido por Reed *et al.* (1994), o valor de 3% do fator de deriva para ventos inferiores a 6 m/s gera bons resultados de simulação de derrames de óleo. Em contrapartida, com o aumento da velocidade do vento, o óleo passa ter um caráter mais dispersivo na coluna d'água, podendo ter menos influência no transporte do óleo (REED *et al.*, 1994).

De acordo com Hoult (1972), a deriva da mancha de óleo devido ao vento pode ser estimada pela arguição que a lei de tensão de cisalhamento turbulento na interface água-ar é aproximadamente a mesma para os dois fluidos. Se a velocidade do vento a alguma distância acima da superfície da água (geralmente 10 metros) é W , então a tensão turbulenta é dada pela equação 20.

$$\frac{1}{2}\rho_{ar}C_{f,ar}W^2 = \frac{1}{2}\rho C_{f,água}U_{água}^2 \quad (20)$$

Nessa hipótese implica que $C_{f,ar} = C_{f,água}$. Dessa forma, segue que a velocidade na água é aproximadamente

$$U_{água} = \left(\frac{\rho_{ar}}{\rho}\right)^{1/2} W \cong 0.03 W . \quad (21)$$

Em seguida, é feita uma nova hipótese que colocando óleo na interface água-ar não mudaria o valor de 3% da velocidade do vento pela pequena diferença entre as massas específicas da água e do óleo.

Com dito acima, as velocidades do vento são medidos a 10 metros de altura de referência acima da superfície da água para que sejam incorporados aos modelos. Entretanto, dados de vento medidos em diferente altura podem ser ajustadas de acordo com a equação 22 (LERH, 2001)

$$W = W_z \left(\frac{10}{z}\right)^{1/7} \quad (22)$$

onde z é altura (m) de medida do vento. Em adição, correções podem também ser feitas se o local de medição do vento é consideravelmente afastado da região de estudo ou se há uma obstrução topográfica (LERH, 2001). Segundo Lehr (2001), alguns modelos possuem esta capacidade de interpolação espacial, entretanto a maior parte utiliza um campo de vento constante espacialmente.

Outro fator que pode ser considerado na deriva do óleo causado pelo vento é a deflexão do ângulo entre a direção do vento e do movimento provocado ao óleo. O valor desse ângulo de deflexão pode variar de 0° a 25° para direita/esquerda da direção do vento (hemisfério norte e sul, respectivamente), com um valor médio de 15° (ASCE, 1996). No estudo desenvolvido por Samuels *et al.* (1982) *apud* Al-Rabeh *et al.* (1993) foi proposto que o ângulo de deflexão está relacionado com a velocidade do vento, de acordo com a equação seguinte:

$$\theta_D = 25 \exp\left(\frac{-10^{-10} W^3}{g\nu}\right) \quad (23)$$

onde ν é a viscosidade cinemática da água do mar e g é a gravidade. Esta formulação foi baseada em observações de campo e considerações teóricas. Na equação 23 a deflexão do ângulo diminui rapidamente com o aumento da magnitude do vento, com uma pequena variação entre 5 a 10 m/s. Para valores superiores a 15 m/s de velocidade, o transporte do óleo é paralelo a direção do vento.

Al-Rabeh *et al.* (1993), em seu trabalho, modifica a equação 23, assumindo a forma:

$$\theta_D = \beta_w \exp\left(\frac{\alpha_w W^3}{g\nu}\right) \quad (24)$$

sendo que os parâmetros β_w e α_w foram adaptados por ajustamento de mínimos quadrados com base em dados obtidos através de derivadores oceânicos.

4.2 ESPALHAMENTO

O espalhamento, também conhecido por espalhamento mecânico, trata-se do movimento da mancha sobre si mesma, horizontalmente, devido às forças inerciais, gravitacionais e viscosas, aumentando a área da mancha. A taxa de espalhamento da mancha de óleo pode afetar outros

processos físicos como a dispersão, evaporação e emulsificação (REED *et al.*, 1999; LEHR, 2001), sendo de grande importância a representação fidedigna do comportamento da mancha durante o processo de espalhamento.

De acordo com Lehr & Simeck-Beatty (2000), o óleo inicia o espalhamento imediatamente quando ele é derramado e que este espalhamento não ocorre uniformemente. Segundo estes autores, qualquer tensão sobre a superfície causa um alongamento na mancha, sendo que na maior parte dos derramamentos esta mancha de óleo rapidamente adquire uma forma de cometa onde a pequena região escura é seguida por uma grande porção brilhosa (Figura 7). Estes autores ainda acrescentam que esta região mais escura, possui a maior volume do óleo derramado, enquanto que a porção fina brilhosa não possui mais que 10% do volume.

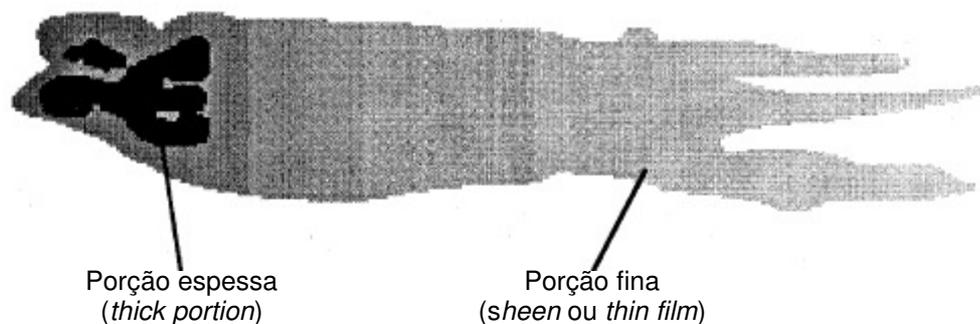


Figura 7. Representação da mancha de óleo em duas partes distintas: porção espessa (*thick portion*) e a porção fina (*sheen* ou *thin film*). Fonte: Lehr & Simecek-Beatty, 2000.

O estudo desenvolvido por Fay (1969) e corroborado por Hoult (1972), forma a base do entendimento do processo de espalhamento do óleo na água. Fay dividiu o processo em três distintas fases, de acordo com as forças governantes que gera e retarda o movimento. No começo do derramamento, as forças dominantes são as inerciais e gravitacionais, pois a espessura da mancha é grande nesse momento. Após, com a diminuição da espessura da mancha, as forças viscosas se tornam mais relevantes comparadas às inerciais e, então, o balanço torna a ser entre forças viscosas e gravitacionais (PALADINO, 2000). Depois de algum tempo exposta, a mancha torna-se muito dispersa sobre a superfície da água, sem coesão, sendo a fase de maior dificuldade para representar (FERNANDES, 2001). Desta forma, a nomeação das fases está de acordo às forças dominantes: gravitacional-inercial, gravitacional-viscosa e viscosa-tensão superficial (Figura 8).

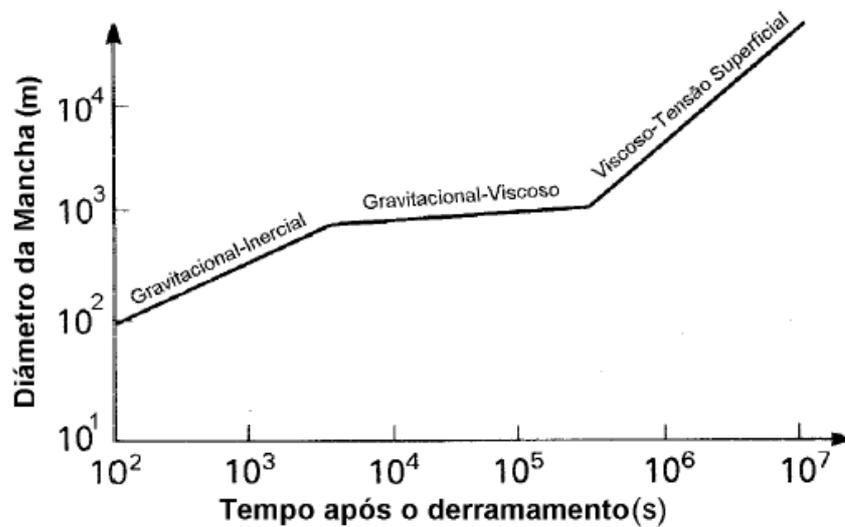


Figura 8. As três fases de espalhamento de uma mancha de óleo. Fonte: Paladino, 2000.

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

$$\alpha_1(\rho - \rho_o)gh_o^2 + \alpha_2\sigma_n = \frac{\alpha_3\rho\nu^{1/2}}{t^{1/2}}R_m \frac{dR_m}{dt} + \rho h \left(\frac{dR_m}{dt} \right)^2 \quad (25)$$

onde R_m é o raio da mancha assumindo um espalhamento simétrico; ρ_o é a massa específica do óleo; σ_n é a tensão interfacial óleo-água; t é o tempo após o derrame; ν é a viscosidade cinemática da água; h_o é a espessura da mancha; α_1 , α_2 e α_3 são constantes empíricas adimensionais.

As soluções dessa mesma equação para as três fases assumem as seguintes formas, com todas as unidades no Sistema Internacional, são apresentadas na Tabela 1.

Entretanto, apesar da teoria de Fay de ser a mais aceita, sabe-se de sua limitação, onde é reconhecido que o espalhamento não pode ser totalmente explicado por suas equações (REED *et al.*, 1999; GUO & WANG, 2009). Os fatores mais importantes que as equações de Fay não conseguem representar são a formação de manchas alongadas, a taxa de espalhamento reduzido de óleos viscosos e quebra da mancha em pequenas porções (REED *et al.*, 1999).

Tabela 1. Fórmulas e coeficientes de Fay para os diferentes regimes de espalhamento.

Fase de espalhamento	L	R	D
Gravitacional-inercial	$1.39(\Delta g A t^2)^{1/3}$	$k_1(\Delta g V t^2)^{1/4}$	$\frac{\pi k_1^2}{8}(\Delta g V t)^{1/2}$
Gravitacional-viscosa	$1.39\left(\frac{\Delta g A^2 t^{3/2}}{v^{1/2}}\right)^{1/4}$	$k_2\left(\frac{\Delta g V^2 t^{3/2}}{v^{1/2}}\right)^{1/6}$	$\frac{\pi k_2^2}{16}\left(\frac{\Delta g V^2}{v^{1/2}}\right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$
Viscosa-Tensão superficial	$1.43\left(\frac{\sigma^2 t^3}{\rho^2 v}\right)^{1/4}$	$k_3\left(\frac{\sigma^2 t^3}{\rho^2 v}\right)^{1/4}$	$\frac{3\pi k_3^2}{16}\left(\frac{\sigma}{\rho v^{1/2}}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{t}}$

Legenda: L é o comprimento característico da mancha para um espalhamento unidimensional; R é o raio da mancha circular; D é o coeficiente de difusão; $\Delta = (\rho - \rho_o) / \rho$; $V_{\text{óleo}}$ é o volume do óleo derramado; $A = 0.5V_{\text{óleo}} / \text{unidade de comprimento da mancha}$; k_1 , k_2 e k_3 são coeficientes.

Visto a limitação da teoria de Fay, vários estudos têm focado na melhor reprodução da realidade do espalhamento do óleo. Mackay *et al.* (1980) *apud* Reed *et al.* (1999) propôs uma variável “grosso-fino” da equação da fase gravitacional-viscosa desenvolvido por Fay, em que a porção espessa supria óleo para a camada fina. Entretanto, o termo representando a diferença de massa específica entre a água e óleo foi incluído em uma constante de espalhamento geral (Equação 26):

$$\frac{dA_S}{dt} = K_M A_S^{-1} V_{\text{óleo}}^{4/3} \quad (26)$$

sendo K_M uma constante empírica com um valor de 150 s^{-2} .

A taxa de espalhamento resultante é, então, independente da massa específica inicial do óleo e indiferente a subsequente mudança causada pela evaporação e emulsificação. O reconhecimento da ligação entre as porções fina e espessa de uma mancha de óleo representa um avanço, mas o modelo de Mackay não tinha qualquer relação baseada na física entre as duas fases da mancha.

Lehr *et al.* (1984a) consideraram o processo do espalhamento como não-simétrico de manchas de óleos durante a fase gravitacional-viscosa, onde a extensão da mancha na direção do vento

aumenta com o tempo na proporção da velocidade desta forçante, enquanto que o espalhamento lateral da mancha foi representado pela equação de Fay. Assim, a mancha é representada no formato de elipse, com as seguintes equações:

$$R = Q + c_2 W^{\frac{4}{3}} t^{\frac{3}{4}} \quad (27)$$

$$Q = c_1 \left(\frac{\rho - \rho_o}{\rho_o} \right)^{\frac{1}{3}} V_{\text{óleo}}^{\frac{1}{3}} t^{\frac{1}{4}} \quad (28)$$

$$A_S = 2270 \left[\left(\frac{\rho - \rho_o}{\rho_o} \right) V_{\text{óleo}} \right]^{2/3} t^{1/2} + 40 \left[\left(\frac{\rho - \rho_o}{\rho_o} \right) V_{\text{óleo}} \right]^{1/3} W^{4/3} t \quad (29)$$

onde R é o eixo maior da elipse (m), Q é eixo menor da elipse (m), $V_{\text{óleo}}$ é o volume inicial do derramamento (barris), W é a velocidade do vento (nós), t é o tempo (minutos), c_1 e c_2 são constantes empíricas, A_S é a área da mancha em m^2 .

No trabalho de Lehr *et al.* (1984b) foram feitas comparações entre medidas feitas em campo da área da mancha e as áreas previstas pelas equações propostas por Fay e por Lehr *et al.* (1984a). Deste estudo, resultou-se que com as equações de Fay houve uma subestimação do tamanho do derrame por mais de uma ordem de magnitude e nem sequer conseguiu reproduzir o tamanho da porção espessa da mancha (Figura 9-A). Já utilizando as equações proposta por Lehr *et al.* (1984a) alcançou-se boas aproximações com os valores mensurados (Figura 9-B), principalmente devido a incorporação do termo do vento no cálculo da área.

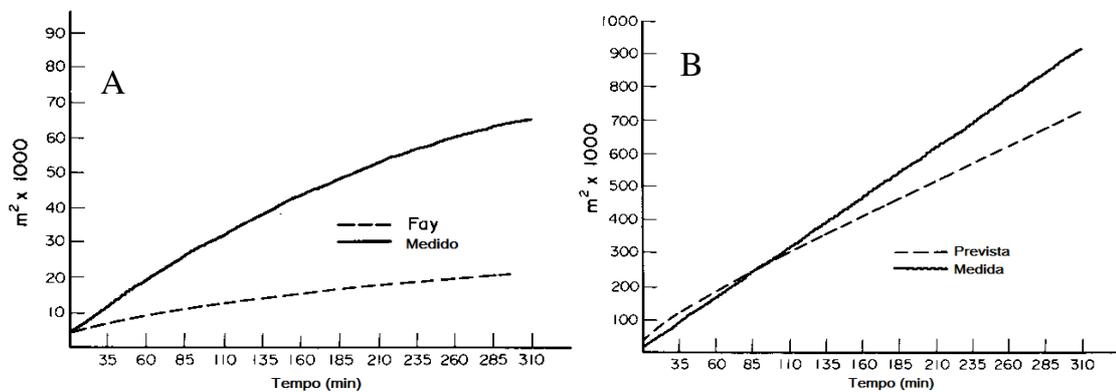


Figura 9. Comparação de área prevista por teoria e área medida: A: Teoria de Fay (1969); B: Teoria de Lehr *et al.* (1984a). Fonte: Lehr *et al.*, 1984b.

Na modelagem computacional de derrames de óleo, uma consideração que normalmente é feita é que a primeira fase do espalhamento, a gravitacional-inercial, não é modelada diretamente por ser muito curta. A forma que se procede é calcular o raio e a área da mancha inicial, e o tempo em que a fase gravitacional-inercial termina, iniciando-se a fase gravitacional-viscosa. A seguir são apresentadas as equações do raio inicial da mancha (considerando um espalhamento simétrico) e o tempo de transição entre as fases:

$$R_0 = \frac{k_2^2}{k_1} \left(\frac{\Delta g V_{\text{óleo}}^5}{v^2} \right)^{1/12} \quad (30)$$

$$t_0 = \left(\frac{k_2}{k_1} \right)^4 \left(\frac{V_{\text{óleo}}}{\Delta g v} \right)^{1/3} \quad (31)$$

em que $\Delta = \left(\frac{\rho_w - \rho_o}{\rho_w} \right)$ e k_1 e k_2 são constantes empíricas.

Além disso, a terceira fase é também freqüentemente inaplicável, uma vez que esta fase só se inicia quando a mancha já é muito fina, resultando muitas vezes numa divisão em pequenas manchas devido aos efeitos do vento. Desta forma, os pressupostos de Fay (1969) não são satisfeitos, visto que a mancha deixa de ser única.

Portanto, é comum utilizar apenas a fase gravitacional-viscosa para calcular o espalhamento, assumindo que quando a espessura da mancha decresce até um determinado valor, o espalhamento termina. Mackay *et al.*(1980) recomendou um valor de 0,1 mm, valor este que foi utilizado no modelo ADIOS. No modelo de Reed (1989) esse mesmo valor é utilizado para crus pesados, enquanto que para as substâncias menos viscosas assume-se o valor de 0,01 mm.

4.3 EVAPORAÇÃO

Dentre os processos de intemperismo ocorrentes em derrames de óleo, a evaporação é o mais importante em termos de balanço de massa. Dentro de alguns dias, por exemplo, óleos leves e óleos médios podem perder até 75% e 40% do seu volume inicial, respectivamente (Figura 10). Já para óleos mais pesados, essa perda não ultrapassa 10% do seu volume (ASCE, 1996).

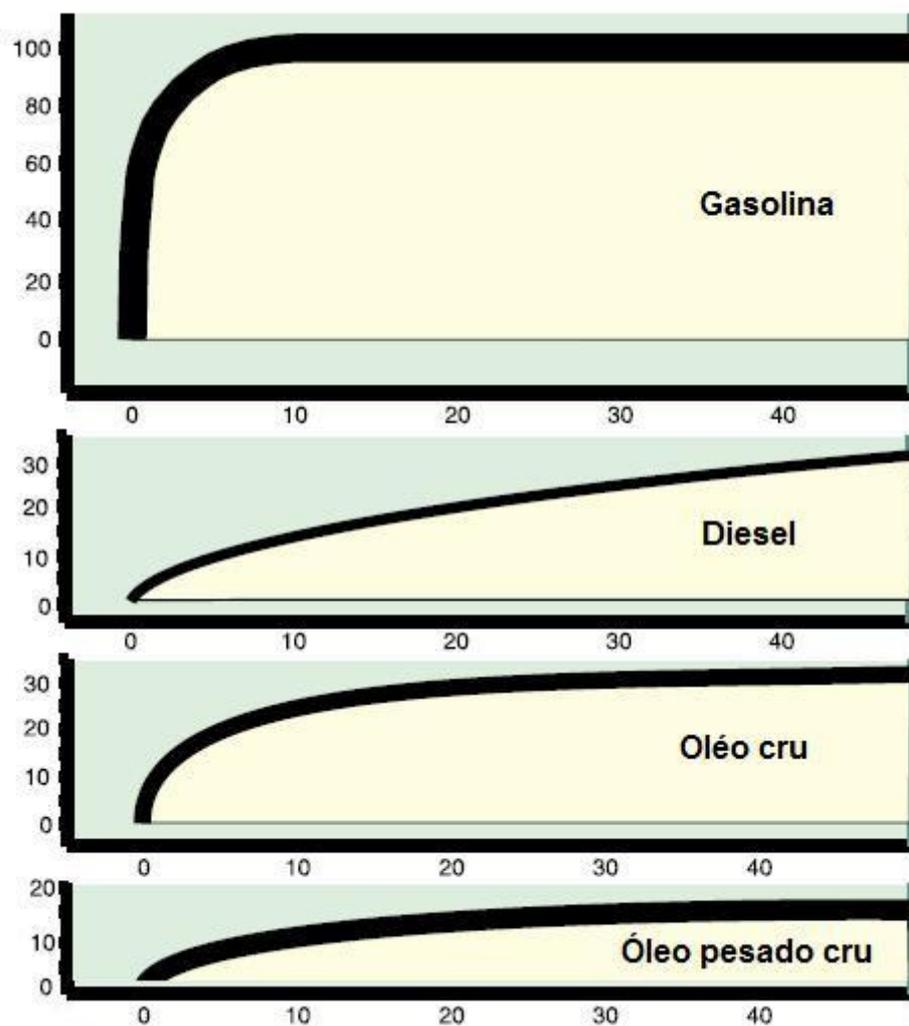


Figura 10. Porcentagem de perda por evaporação em diferentes tipos de óleo. Modificado de Ocean Studies Board and Marine Board, 2003.

Apesar da importância do processo, de acordo com Ocean Studies Board and Marine Board (2003) pequenos esforços têm sido conduzidos sobre a física e química básica da evaporação de derrame de óleo. A dificuldade com a evaporação reside na composição do óleo, que consiste de mistura de centenas de compostos e esta composição varia de acordo com a fonte do petróleo e com o tempo em que o óleo está exposto. Dessa forma, de acordo com Fingas (1995), muitos dos trabalhos descritos na literatura focam sobre a calibração das equações desenvolvidas para evaporação da água.

No trabalho de revisão de processos que ocorrem no óleo realizado por Reed *et al.* (1999), afirmam que existem basicamente dois métodos de cálculo da evaporação:

- Método de pseudo-componentes, desenvolvido por Payne *et al.* (1987);

- Método da exposição evaporativa, desenvolvido por Stiver & Mackay (1984).

O primeiro método considera os óleos crus e seus derivados como uma mistura independente de diversos componentes (pseudo-componentes), onde cada um é tratado como uma mistura singular associada a uma pressão de vapor.

Já o método da exposição evaporativa é baseado na hipótese simplista da relação linear entre o ponto de ebulição da fase líquida e a fração perdida. A expressão para esse método é dada por:

$$\frac{dF_v}{dt} = \frac{Q_v A_S}{V_{\text{óleo}}} \cdot \exp\left(A_E - \frac{B_E}{T}(T_0 + T_G F_v)\right) \quad (32)$$

sendo F_v a fração volumétrica de óleo evaporado; Q_v é o coeficiente de transferência de massa; T é a temperatura do óleo; A_E e B_E são constantes empíricas nas quais, a versão 1.1 do modelo ADIOS (NOAA, 1994), adota, respectivamente, valores de 6,3 e 10,3; T_0 e T_G , concomitantemente, simulam o ponto de ebulição inicial do óleo e o gradiente de curva de destilação.

Distintas formulações para esses últimos termos são encontradas. A primeira, aqui apresentada, vem de Shen & Yapa (1988) *apud* Paladino (2000):

$$\begin{aligned} T_0 &= 542,6 - 30,275API + 1,565API^2 - 0,03439API^3 + 0,0002604API^4 \\ T_G &= 1158,9API^{-1,1435}(T/B) \end{aligned} \quad (33)$$

onde API é o grau de densidade relativa do óleo e B é uma constante empírica. No modelo ADIOS (NOAA, 1994), são fornecidas as formulações:

$$\begin{aligned} T_0 &= 532,98 - 3,1295API \quad (\text{óleos crus}) \\ T_0 &= 654,45 - 4,6588API \quad (\text{produtos refinados}) \\ T_G &= 1356,7 - 247,36 \cdot \ln(API) \end{aligned} \quad (34)$$

4.4 DISSOLUÇÃO

A dissolução é o processo em que os hidrocarbonetos solúveis se fragmentam em partículas pequeníssimas, misturando-se com a água e originando uma massa líquida homogênea entre ambos. A reduzida presença de hidrocarbonetos solúveis no petróleo resulta numa baixa perda de hidrocarbonetos por dissolução, quando comparado com outros processos (FERNANDES, 2001).

A dissolução não é considerada em todos os modelos numéricos porque o efeito no balanço de massa de óleo é pequeno. Normalmente muito menos que 1% do óleo exposto na superfície se dissolve. A dissolução pode, entretanto, ser de grande importância do ponto de vista toxicológico. Os compostos mais solúveis são normalmente os mais tóxicos. Mesmo a concentração baixa destes componentes pode levar a sérios efeitos nos sistemas biológicos (ASCE, 1996).

O processo físico da dissolução é bem compreendido, entretanto a descrição nos casos de derrames de óleo é complicada devido à complexidade da composição do óleo com centenas de componentes e a necessidade de descrever a dissolução de um simples componente em um parâmetro específico (ASCE, 1996).

Outra dificuldade do processo de dissolução é o antagonismo com a evaporação. Nos derrames superficiais a evaporação de componentes voláteis do óleo é processo relativamente rápido e ocorre na escala de horas. Uma forte correlação existe entre a volatilidade e a solubilidade dos componentes. Para manchas superficiais, uma vez que as pressões parciais tendem a exceder as solubilidades dos compostos de menor peso molecular, verifica-se uma predominância de massa evaporada relativamente à dissolução.

Este processo pode ser quantificado através do método de Cohen *et al.* (1980) *apud* Fernandes (2001). Neste método, a taxa de dissolução é calculada através de:

$$\frac{dDiss}{dt} = K_{diss} f_d A_s S (gh^{-1}) \quad (35)$$

onde f_d é a fração de superfície da partícula de óleo coberta por água (igual ao conteúdo de óleo na emulsão óleo-água); A_s é a área da mancha de óleo (m^2) e S é a solubilidade do óleo

na água; t é o tempo após o derrame (h) e K_{diss} é o coeficiente de transferência de massa por dissolução ($0,01\text{m}\cdot\text{h}^{-1}$).

4.5 DISPERSÃO VERTICAL

A dispersão vertical, também denominado somente dispersão, é um processo físico em que as gotículas de óleo são transportadas a partir da superfície do mar para a coluna de água, sobretudo devido à rebentação das ondas (FERNANDES, 2001). Essas gotículas podem ter dimensões variáveis, estando sujeitas á ação de turbulência natural da água.

Os primeiros modelos de dispersão simplesmente assumiam uma taxa de dispersão constante como porcentagem da mancha de óleo por dia, baseado no estado do mar. Estas taxas tendiam a ser muito grande, entre 10 a 60% por dia.

Mackay *et al.* (1980), de acordo com Reed *et al.* (1999) e Lehr (2001), construíram uma fórmula baseado na estimativa da fração da superfície do mar sujeita a dispersão por unidade de tempo, complementada por uma estimativa da fração de óleo entranhado com o tamanho suficiente para permanecer dispersa na coluna d'água.

O modelo de dispersão baseado no trabalho experimental de Delvigne & Sweeney (1988) é o mais comum nos modelos de derrames de óleo (REED *et al.*, 1999). Estes autores desenvolveram uma série de estudos laboratoriais acerca da dispersão natural do óleo, resultando em uma relação empírica para a taxa de dispersão do óleo para a coluna de água devida à rebentação das ondas:

$$\frac{dm_d}{dt} = c_{\text{óleo}} \cdot D_{ba}^{0,57} \cdot f_s \cdot F_{WC} \cdot d_0^{0,7} \cdot \Delta d \quad (36)$$

Em que f_s é a fração de superfície coberta por óleo; d_0 é o diâmetro das partículas de óleo; Δd é o intervalo de diâmetros das partículas; $c_{\text{óleo}}$ é um parâmetro determinado experimentalmente e depende do tipo de óleo; D_{ba} é a energia de dissipação das ondas por unidades de área; F_{WC} é a fração de superfície de mar atingida pela rebentação das ondas por unidade de tempo.

Uma forma mais simples de determinação da dispersão é através da fórmula de Mackay *et al.* (1980) *apud* Reed *et al.* (1999) que parametriza a dispersão em função do quadrado da velocidade:

$$\frac{dm_{\text{óleo}}}{dt} = 0,11m_{\text{óleo}} \frac{(1+W)^2}{1+50\mu^{1/2}h\sigma_n} \quad (37)$$

A taxa de transferência de massa por hora é determinada em função da massa de óleo que permanece na superfície ($m_{\text{óleo}}$), da viscosidade dinâmica do óleo (μ), da espessura da mancha (h), velocidade do vento (W) e da tensão na interface óleo e água (σ).

4.6 SEDIMENTAÇÃO

Sedimentação é definida como a adesão do óleo a partículas sólidas na coluna d'água (LERH, 2001), originando um aumento da massa volumétrica e conseqüentemente o movimento descendente das partículas na coluna de água até ao fundo do mar. A significância da sedimentação para um processo de remoção depende fortemente da carga sedimentar do corpo d'água.

O processo de sedimentação de petróleo é relativamente complicado, e de difícil contabilização. Alguns estudos indicam que o processo é afetado pelo tipo e tamanho do material suspenso, salinidade da água e quantidade de enxofre de óleo (LEHR, 2001).

Outros têm sugerido que o tamanho das pequenas porções de óleo, em que está diretamente relacionado a viscosidade do óleo e energia da onda (LEHR, 2001). A formulação que é mostrada a seguir foi proposta por Payne *et al.* (1987) *apud* Lehr (2001), a qual resulta na massa de óleo sedimentado por unidade de tempo (kg.s-1):

$$\frac{dm_{\text{sed}}}{\partial t} = 1.3\sqrt{\frac{E}{v}}K_a C_{\text{col}} C_{\text{sed}} z_i A_s \quad (38)$$

em que: K_a é o parâmetro de adesão, que toma o valor de $10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}$; z_i é a profundidade de intrusão das partículas de óleo na coluna de água devido à rebentação das ondas; E é a

taxa de energia dissipada da superfície da água, C_{sed} é a concentração de sedimentos na coluna da água, C_{col} é a concentração das partículas de óleo na coluna da água.

4.7 OXIDAÇÃO

Oxidação é a reação de combinação ou quebra entre as moléculas de hidrocarbonetos com o oxigênio, promovida pela luz solar. Essas reações contribuem para o intemperismo do óleo, uma vez que forma compostos solúveis (CETESB, 2008), e intervém em outros processos, tais como dissolução, dispersão e emulsificação. Existem muitos fatores que interferem, acelerando ou retardando o processo de oxidação tais como os sais minerais dissolvidos em água, que aceleram a taxa de oxidação; os metais traço, que agem como catalizadores da reação de oxidação, ao passo que compostos de enxofre na mistura, faz decrescer essa taxa; e a radiação ultravioleta, que auxilia no processo de oxidação.

Entretanto a oxidação se dá em velocidade muito pequena comparada aos outros processos, tendo então efeito menor no espalhamento da mancha.

5 APRIMORAMENTO DO MODELO LAGRANGIANO DE PARTÍCULAS (MLPDA)

5.1 ADVECCÃO DEVIDO AO VENTO

5.1.1 Introdução no modelo lagrangiano

À luz da literatura, a efeito do vento na mancha de óleo considerado para a inserção no modelo é 3% da velocidade desta forçante, sendo medido a 10 m de altura da superfície da água. É desconsiderada a deflexão da direção do transporte do óleo com relação ao vento ao se entender que poucos estudos têm sido conduzidos nesta direção e poucos modelos na atualidade consideram tal fator. Dessa maneira, foi inserido na equação da posição da partícula (Equação 17) o efeito do vento, resultando nas equações 39 e 40.

$$x_{n+1} = x_n + \left[U_{cor} + \frac{\Delta D_{xx}}{H} \frac{\Delta H}{\Delta x} + \frac{\Delta D_{xx}}{\Delta x} \right] \Delta t + \sqrt{2D_{xx}} \zeta_{x_n} \Delta t + 0.03U_{vento} \Delta t \quad (39)$$

$$y_{n+1} = y_n + \left[V_{cor} + \frac{\Delta D_{yy}}{H} \frac{\Delta H}{\Delta y} + \frac{\Delta D_{yy}}{\Delta y} \right] \Delta t + \sqrt{2D_{yy}} \zeta_{y_n} \Delta t + 0.03V_{vento} \Delta t \quad (40)$$

onde U_{vento} e V_{vento} são componentes do vento.

O campo de velocidade do vento introduzido ao modelo pode ser do tipo constante ou variável, tanto temporal como espacialmente. Para um campo de vento variável no tempo, é feito uma interpolação linear entre o espaçamento temporal do dado fornecido ao modelo. Já para um campo de vento variável no espaço, o valor do vento na partícula é obtido através da interpolação da posição que a partícula ocupa com os valores de velocidade do vento próximos, similar ao utilizado entre o modelo hidrodinâmico e o lagrangiano.

5.1.2 Inserção no algoritmo do MLPDA

A seguir (Figura 11), é apresentado o algoritmo do modelo lagrangiano de trajetória de partículas com a opção para a influência do vento juntamente com o cálculo da evaporação e dos tipos de cálculo de concentração, implementados por Gaze (2009) :

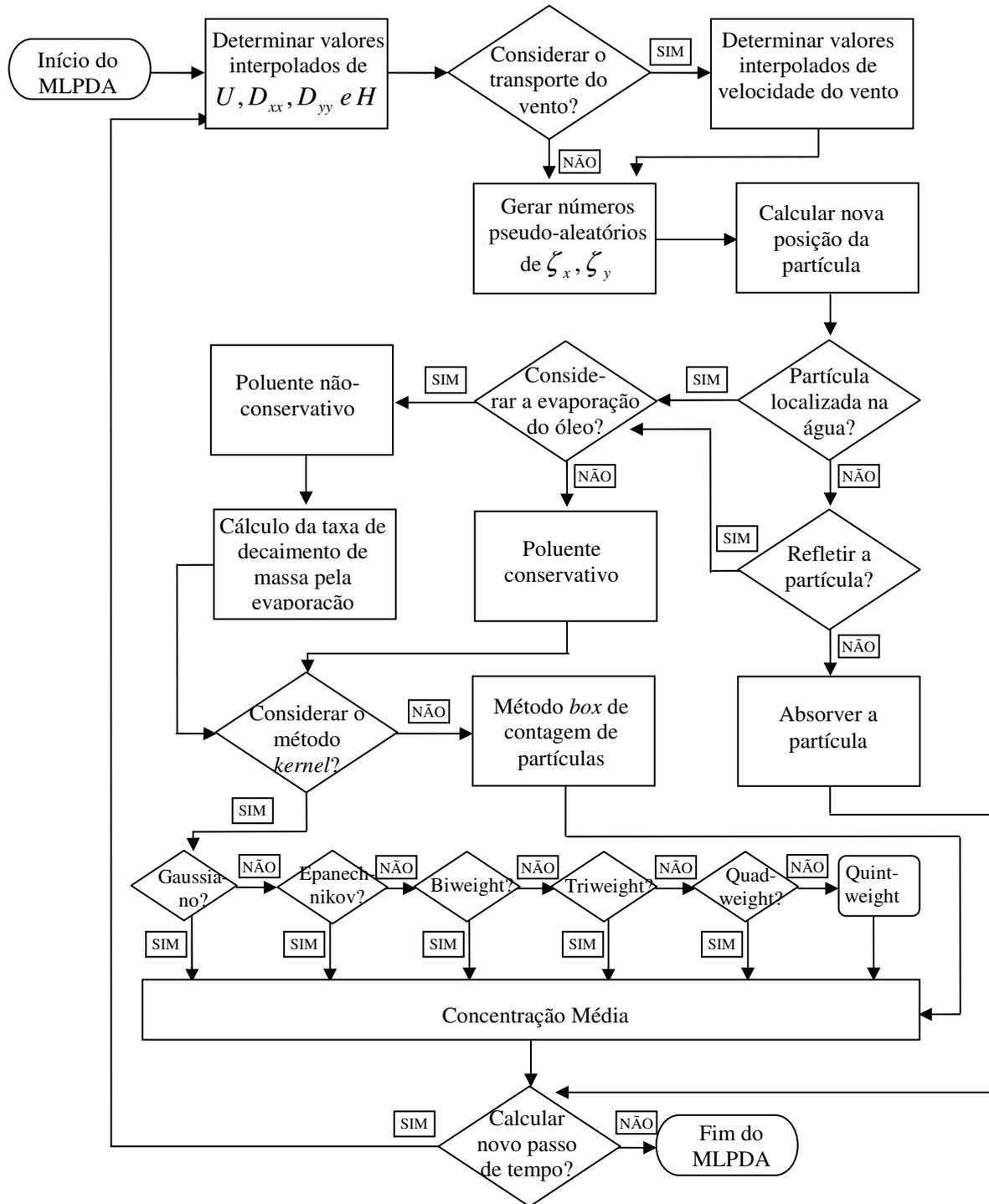


Figura 11. Algoritmo do MLPDA com o cálculo do efeito do vento inserido.

5.1.3 Testes realizados

A forma encontrada para testar a introdução do efeito do vento consistiu em acompanhar a trajetória de uma partícula submetida somente ao transporte provocado pelo vento, sem o efeito da hidrodinâmica e da difusão. Dessa forma, a distância percorrida pela partícula em um intervalo de tempo é averiguada e confrontada de acordo com o resultado esperado, uma vez que essa relação é direta ($\Delta S = 0.03 \cdot \text{Velocidade do vento} \cdot \Delta t$).

Foram realizados testes para diferentes velocidades do vento (1, 2, 4 e 5 m/s) e uma distância de 1.8 km. É esperado que o tempo transcorrido para simulação seja de 1000, 500, 250 e 200 minutos para os ventos de 1, 2, 4 e 5 m/s, respectivamente.

Ao observar a Figura 12 pôde-se perceber que os deslocamentos causados por diferentes valores de vento tiveram o comportamento satisfatório, de acordo com os valores esperados, representado êxito na implementação do algoritmo.

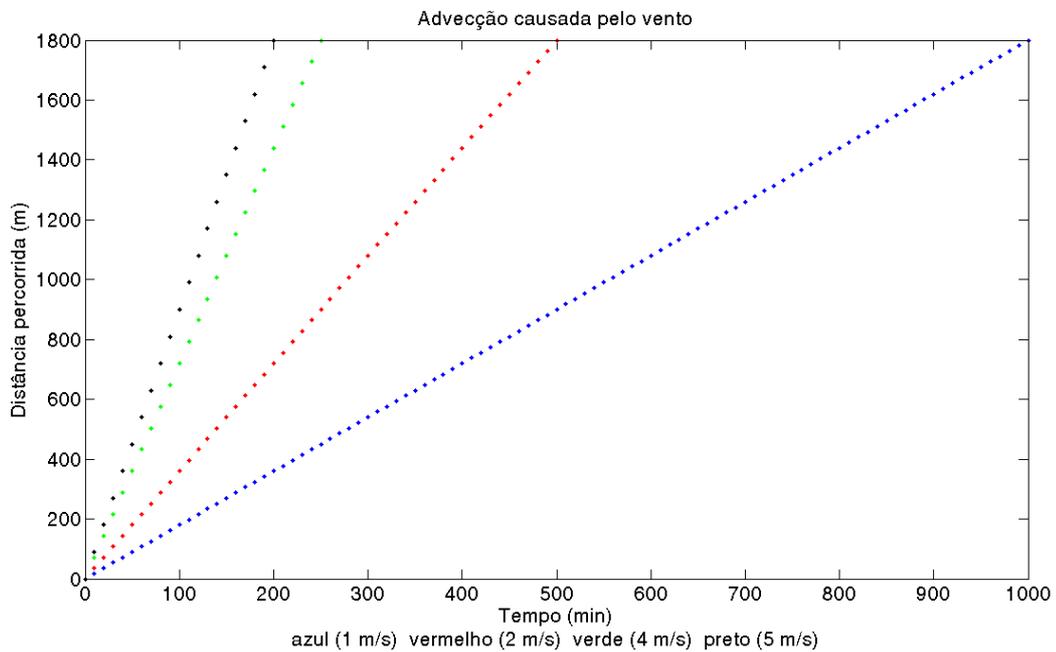


Figura 12. Deslocamento da partícula pelo transporte do vento.

5.2 PROCESSO FÍSICO DE ESPALHAMENTO

5.2.1 Introdução do processo físico no modelo lagrangiano

Dentre os processos que acontecem na mancha de óleo, foi escolhido o processo de espalhamento para ser inserido no modelo lagrangiano. O estudo de Lehr *et al.* (1984a) é o adotado neste trabalho, visto que este método tem sido aplicado em estudos atuais (ver Chao *et al.*, 2001; Chao *et al.*, 2003; Guo & Wang, 2009; Guo *et al.*, 2009) e tem obtido bons resultados de simulação.

A metodologia aplicada é a mesma apresentada em Guo & Wang (2009) e Guo *et al.* (2009). O espalhamento do óleo considerada neste estudo tem como base a formação de uma mancha elíptica com o eixo maior paralelo a direção do vento, seguindo as equações a seguir.

$$Q = 53.761 \left(\frac{\rho - \rho_o}{\rho_o} \right)^{\frac{1}{3}} V_{\text{óleo}}^{\frac{1}{3}} t^{\frac{1}{4}} \quad (41)$$

$$R = Q + 0.947W^{\frac{4}{3}} t^{\frac{3}{4}} \quad (42)$$

Onde R é o eixo maior da elipse (m), Q é eixo menor da elipse (m), ρ_o e ρ são respectivamente a massa específica do óleo e da água (kg/m^3), V é o volume inicial do derramamento (em barris), W é a velocidade do vento (em nós) e t é o tempo (minutos).

Em seguida, é utilizado o conceito de similaridade de elipses, onde é considerado que a mancha elíptica do óleo é composta por várias outras elipses menores na sua parte interior e que possuem raios r (maior) e q (menor), de tal forma que $q/r = Q/R$. Assim, é assumido que em qualquer passo de tempo, as elipses internas movem-se para fora (com relação ao centro da mancha) em proporção a taxa da elipse mais externa (Figura 13).

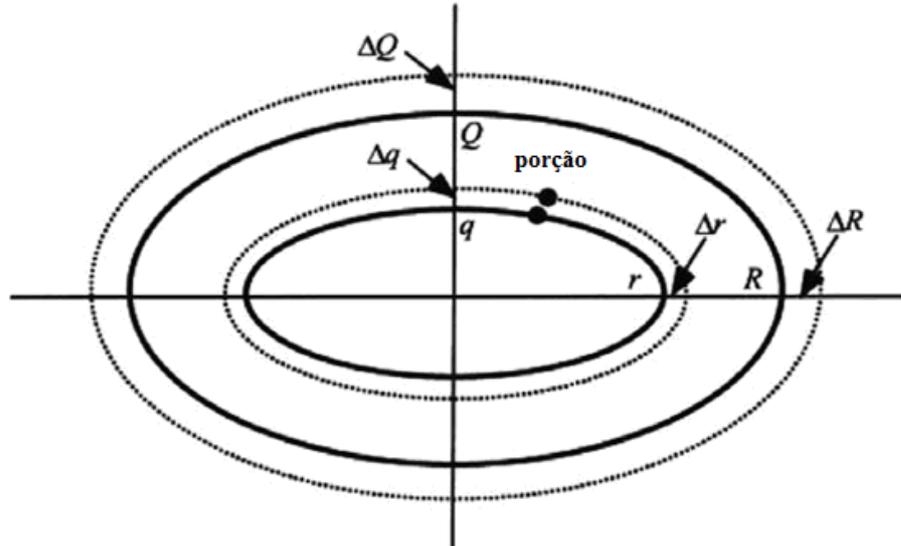


Figura 13. Modelo para o mecanismo de espalhamento de uma mancha de óleo. Adaptado de Guo *et al.* (2009).

Se as coordenadas relativas da partícula aos eixos principais da elipse são X e Y , cujo eixo- x é selecionado na direção do vento, escreve-se que $X = r \cdot \cos \theta$ e $Y = r \cdot \sin \theta$. Assim, a partícula é deslocada para fora com o mesmo ângulo elíptico θ , resultando em

$$\Delta X_s = \Delta r \cos \theta = \Delta r \left(\frac{X}{r} \right) = X \left(\frac{\Delta R}{R} \right) \quad (43)$$

$$\Delta Y_s = \Delta q \sin \theta = \Delta q \left(\frac{Y}{q} \right) = Y \left(\frac{\Delta Q}{Q} \right) \quad (44)$$

onde

$$\Delta Q = 13.44025 \left(\frac{\rho - \rho_o}{\rho_o} \right)^{\frac{1}{3}} V^{\frac{1}{3}} t^{\frac{-3}{4}} \Delta t \quad (45)$$

$$\Delta R = \Delta Q + 0.71025 W^{\frac{4}{3}} t^{\frac{-1}{4}} \Delta t \quad (46)$$

Para se obter o sistema de eixos com base na elipse para qualquer direção do vento e em qualquer ponto do domínio, é necessário o cálculo de um novo sistema de eixos tendo como o centro desse sistema, o próprio centro da elipse. Assim, primeiramente é empregada a translação do sistema de coordenadas, de acordo com a Figura 14.

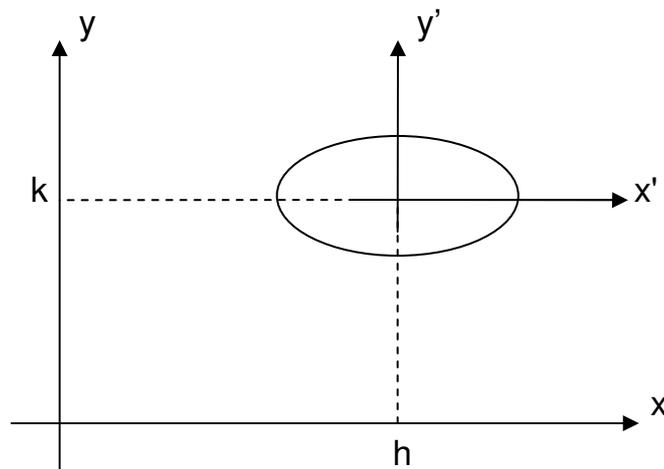


Figura 14. Translação de sistemas de coordenadas para o cálculo do espalhamento.

Na Figura 14, h e k são as coordenadas do centro da elipse, onde a relação entre as coordenadas dos sistemas é definida através de $x' = x - h$ e $y' = y - k$. No MLPDA, o cálculo do centro da elipse é determinado pelas equações:

$$h = x_{\text{médio}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (47)$$

$$k = y_{\text{médio}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad (48)$$

onde n é igual a número de partículas, x_i e y_i são as coordenadas das partículas no domínio principal.

Posteriormente, é utilizada a rotação de sistema de coordenadas em função da direção do vento predominante, em concordância com a Figura 15.

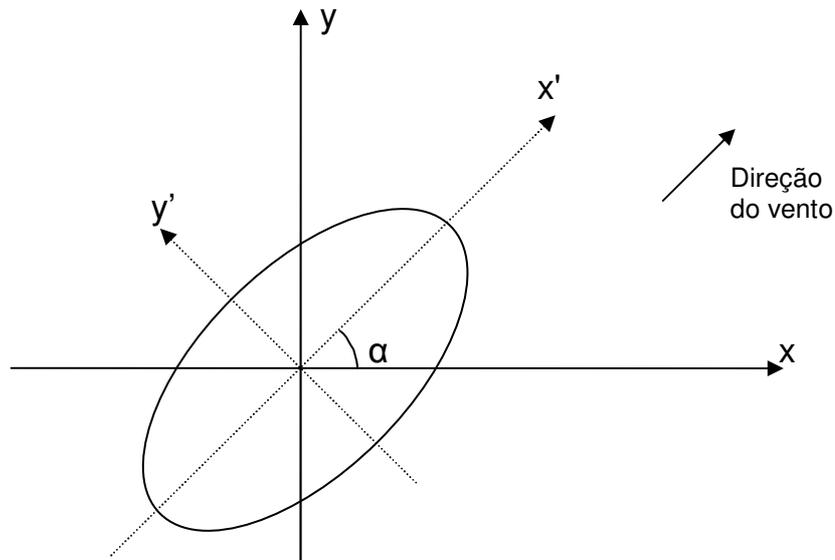


Figura 15. Rotação de sistemas de coordenadas para o cálculo do espalhamento.

Dessa forma, a relação entre as coordenadas é dada por:

$$x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha \quad (49)$$

$$y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha \quad (50)$$

em que α é o ângulo entre o sistema de coordenadas rotacionado e o referencial e é determinado por:

$$\alpha = \arctan\left(\frac{v_{\text{vento}}}{u_{\text{vento}}}\right) \quad (51)$$

onde u_{vento} e v_{vento} são as componentes do vetor vento. Para calcular as coordenadas (x, y) usa-se:

$$x = x' \cos \alpha - y' \sin \alpha \quad (52)$$

$$y = x' \sin \alpha + y' \cos \alpha \quad (53)$$

Visto todas estas transformações, as equações 39 e 40 da posição da partícula considerando o efeito do espalhamento são modificadas para

$$x_{n+1} = x_n + \left[U_{cor} + \frac{\Delta D_{xx}}{H} \frac{\Delta H}{\Delta x} + \frac{\Delta D_{xx}}{\Delta x} \right] \Delta t + \sqrt{2D_{xx}} \zeta_{x_n} \Delta t + 0.03U_{vento} \Delta t + \Delta X_s \quad (54)$$

$$y_{n+1} = y_n + \left[V_{cor} + \frac{\Delta D_{yy}}{H} \frac{\Delta H}{\Delta y} + \frac{\Delta D_{yy}}{\Delta y} \right] \Delta t + \sqrt{2D_{yy}} \zeta_{y_n} \Delta t + 0.03V_{vento} \Delta t + \Delta Y_s \quad (55)$$

5.2.2 Área inicial da mancha de óleo

Como dito no item 4.2, nos modelos atuais de simulação de espalhamento de óleo, a primeira fase desse processo não é simulada, sendo o início da modelagem o início da segunda fase, a gravitacional-inercial. Deste modo, é inserido ao modelo a opção de distribuição das partículas ao longo de uma área determinada pela equação (LEHR, 2001):

$$A_0 = 3.4\pi \left(\frac{\Delta g V_{\text{óleo}}^5}{v^2} \right)^{\frac{1}{6}} \quad (56)$$

sendo que esta área é determinada no tempo (LEHR, 2001):

$$t_0 = 2.6 \sqrt[3]{\frac{V_{\text{óleo}}}{g\Delta v}} \quad (57)$$

em que $\Delta = \left(\frac{\rho - \rho_o}{\rho} \right)$; g é a aceleração da gravidade; $V_{\text{óleo}}$ é o volume do derrame de óleo e

v é a viscosidade cinemática da água. A distribuição das partículas é dada em dois formatos: em forma circular e em forma elíptica.

A distribuição das partículas em um círculo é empregada em situações onde não há consideração do vento. Essa distribuição é dada através da relação entre o raio deste mesmo círculo com o diâmetro que as partículas, considerando que estas têm um formato esférico. Dessa relação obtém-se o número de radiais em que serão distribuídas as partículas. A Figura 16 ilustra esta distribuição.

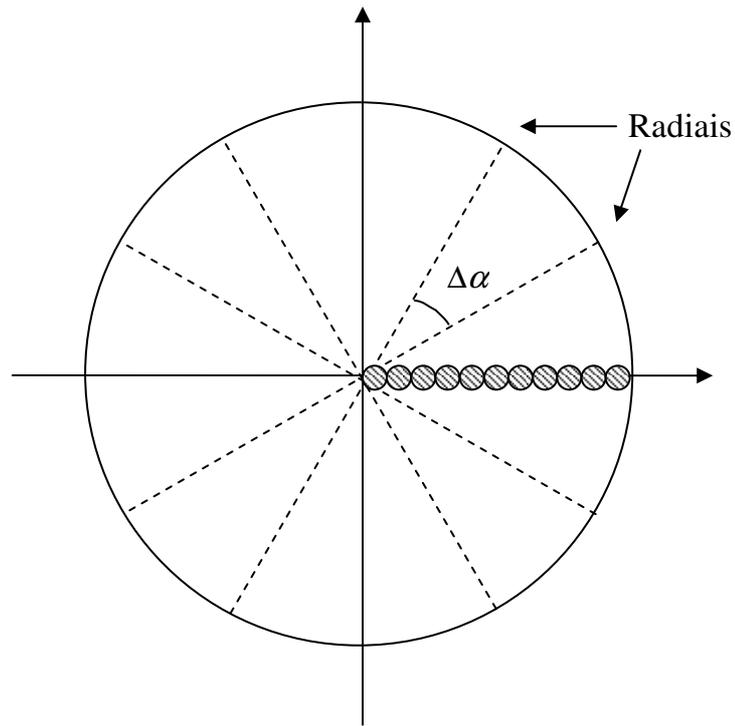


Figura 16. Distribuição das partículas de forma circular.

Em contrapartida, em condições que há consideração do vento, a distribuição das partículas tem como base uma elipse, onde seu eixo maior (R) é orientado na direção do vento. A distribuição se procede de forma similar aplicada ao círculo, sendo que a base do cálculo é dada pela relação entre o eixo menor da elipse (Q) e o diâmetro das partículas, como ilustra a Figura 17.

Entretanto, como a base da distribuição das partículas é uma elipse, fica inaplicável a equação 56 a essa condição, pois foi baseada para um círculo. Para contornar tal incômodo, é aplicada a equação 57 às equações 41 e 42, para assim prosseguir com a distribuição.

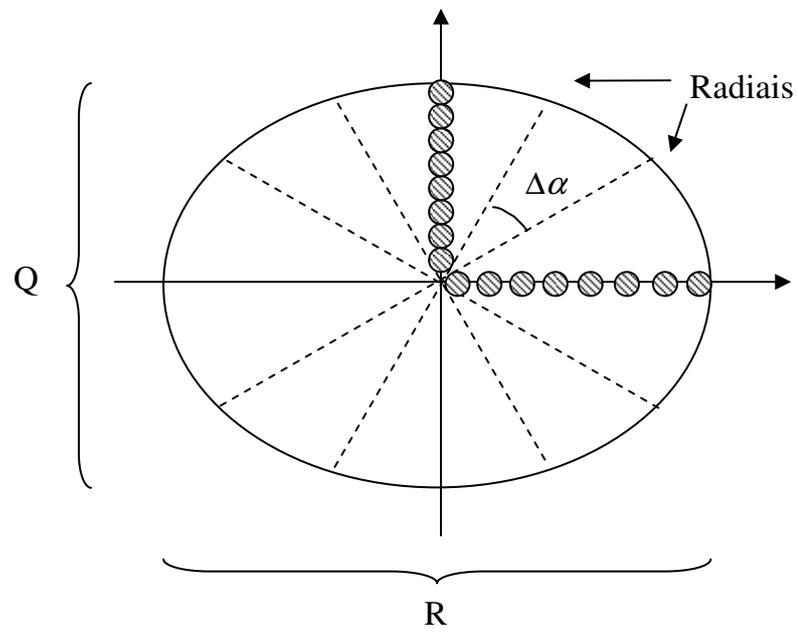


Figura 17. Distribuição das partículas de forma elíptica.

5.2.3 Inserção no algoritmo do MLPDA

Nesta seção é apresentado o algoritmo do modelo lagrangiano de trajetória de partículas com o processo físico do espalhamento, bem como o tipo de distribuição de partícula (Figura 18).

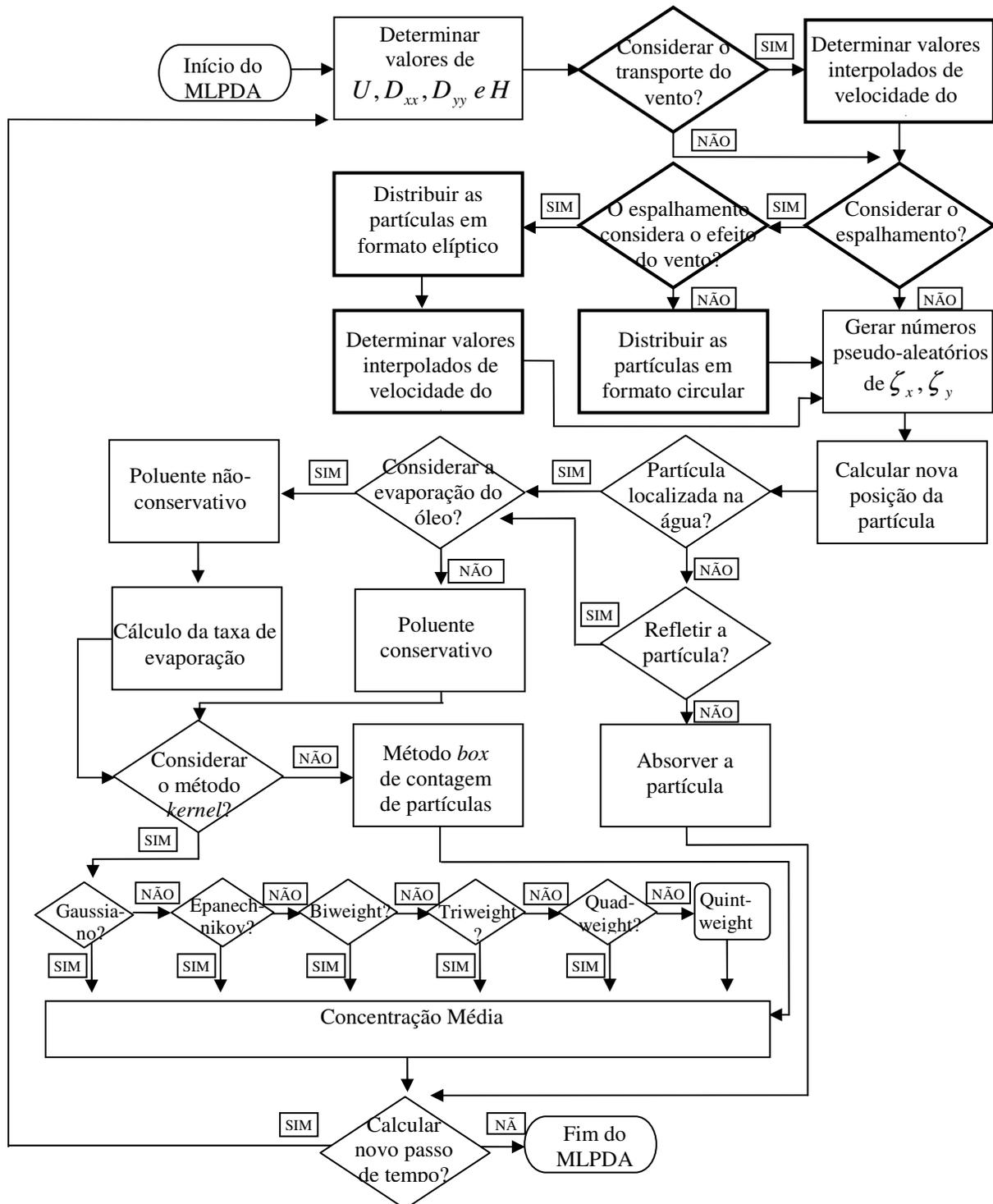


Figura 18. Algoritmo do MLPDA com o cálculo do efeito do vento inserido. Em destaque, a mudança inserida no algoritmo do MLPDA.

5.2.4 Testes realizados para o algoritmo do espalhamento

Foram realizados testes para averiguação dos algoritmos inseridos no MLPDA utilizando uma baía hipotética quadrangular de $5.000 \times 5.000 \text{ m}$ sem qualquer hidrodinâmica, com profundidade uniforme de 10 m e sem evaporação do óleo (Figura 19). De acordo com o propósito do teste, foram usados diferentes valores de volume.

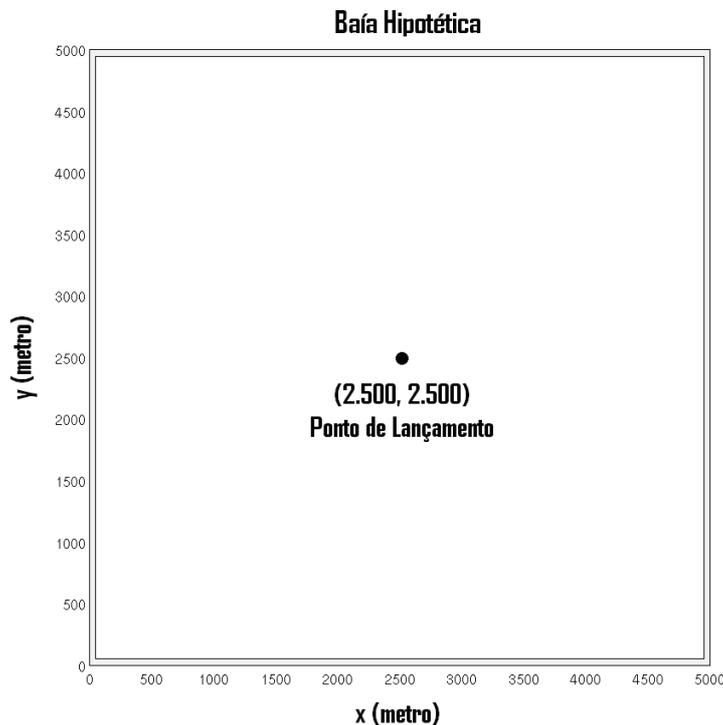


Figura 19. Baía hipotética de realização dos testes.

Primeiramente os testes realizados focaram a relação da equação 56, equação do tamanho inicial da mancha de óleo (A_0), com a evolução do aumento da área da mancha. Foi observado o comportamento do crescimento da mancha um derrame instantâneo de $1,5 \text{ m}^3$ no ponto central da baía ($2.500\text{m} \times 2.500\text{m}$) sem a influência do vento no processo de espalhamento (Figura 20). Posteriormente, é feita a mesma avaliação com a presença de um vento de 1 m/s (Figura 22).

Para avaliar a evolução do crescimento da área da mancha de óleo, é acompanhado o deslocamento de uma partícula localizada na parte mais externa da mancha. Na situação sem ocorrência de vento, qualquer partícula da borda está apta para representar o raio da mancha, e

consequentemente a área da mancha, pois o espalhamento das partículas é de forma simétrica. Já para a situação com presença de vento, é necessário o acompanhamento de, pelo menos, duas partículas, uma sobre o eixo maior da elipse e outra sobre o eixo menor, sendo estas na parte mais externa da elipse, para conhecer a área da mancha elíptica.

Analisando as curvas da Figura 20 é notável que o tamanho da área e do raio do círculo não evolui de acordo com a equação de Lehr *et al.* (1984a) (doravante simplesmente chamado de teoria de Lehr nesta seção), estando bem abaixo do resultado esperado. Ao final de 50h, a área simulada é inferior a metade da área teórica, representando baixa capacidade de previsão da extensão da mancha.

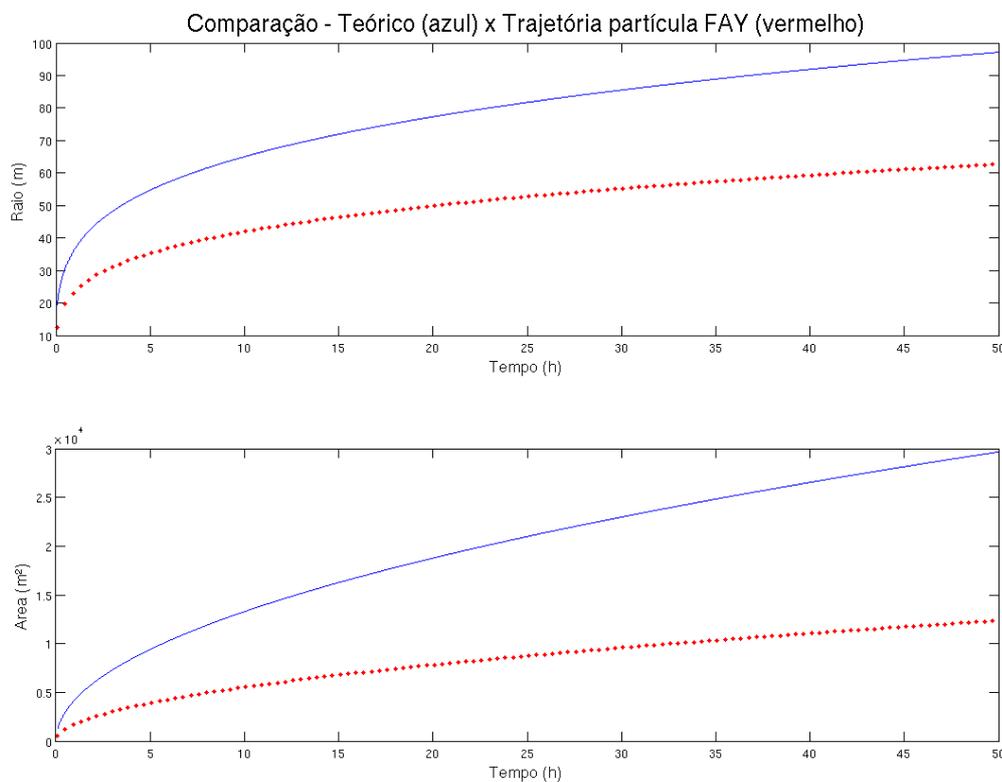


Figura 20. Comparação entre a teoria e a simulação do raio e da área da mancha de óleo para um volume de $1,5 m^3$ de óleo.

Para solucionar tal ineficácia de previsão, foi necessário propor uma adequação a equação 56 para que houvesse mudança no comportamento do espalhamento. Dessa forma, a solução encontrada foi ajustar a constante (3.4) da equação com base na aplicação da equação 57 na equação 41 e comparando com a equação 56. Assim, alcançou-se a seguinte equação 58.

$$A_0 = 8.12\pi \left(\frac{\Delta_w g V^5}{v^2} \right)^{\frac{1}{6}} \quad (58)$$

Uma vez obtido a equação 58, foi realizado novamente teste para avaliar o comportamento da mancha de óleo. Analisando os resultados expostos pela Figura 21, é possível notar que houve uma melhora significativa da previsão área da mancha, havendo uma sobreposição da área simulada sobre área teórica de Lehr.

Avaliando a segunda parte da área inicial, a Figura 22 mostra os resultados do comportamento da área de forma elíptica da mancha. É perceptível a sobreposição dos resultados. Este comportamento era esperado uma vez que a origem das equações da área inicial da elipse são as próprias equações de Lehr (Equação 41 e 42) aplicado ao tempo t_0 (Equação 57).

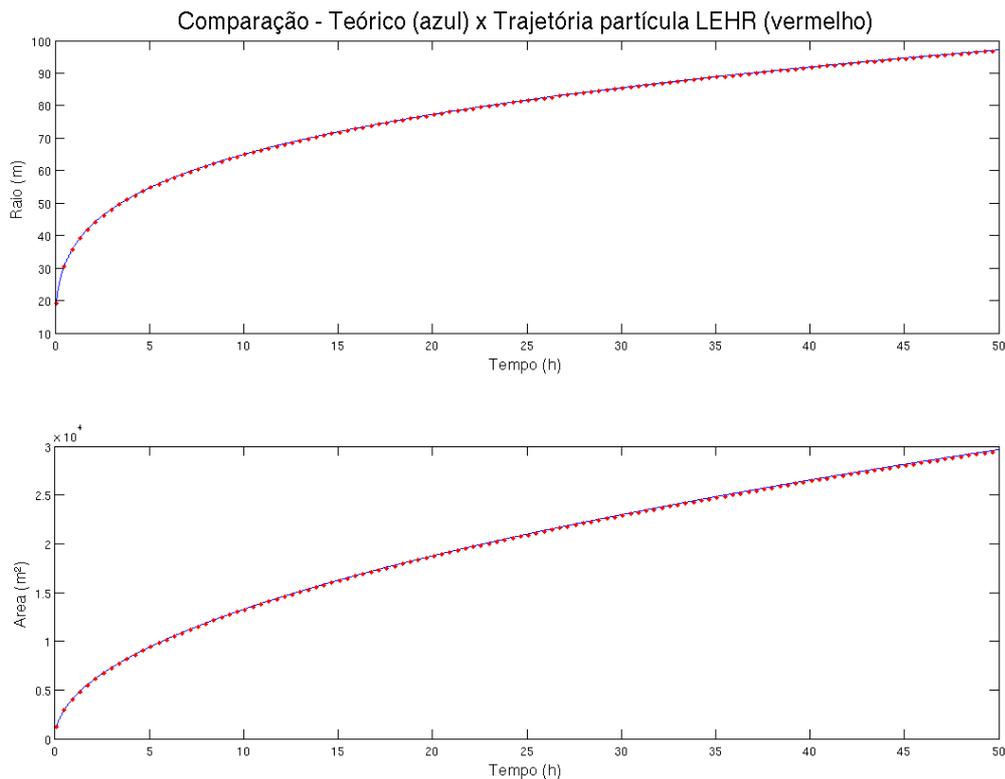


Figura 21. Comparação entre a teoria e a simulação do raio e da área da mancha de óleo após o ajuste da equação da área inicial circular.

Estes resultados conduzem a uma importante observação em modelagem computacional de óleo: a importância da consideração correta da área inicial da mancha. É visto em alguns trabalhos a aplicação de equação da área inicial baseado em recomendações de outros estudos

sem considerar seu método de cálculo do espalhamento e nem as condições hidrodinâmicas, como no estudo de Janeiro *et al.* (2008). Como salientado na Figura 20, o simples fato de um início errôneo pode levar a uma subestimação ou superestimação da área da mancha, ocasionando em uma leitura errada dos resultados, como nos processos de intemperismo do óleo, onde a área da mancha é uma das principais variáveis de entrada.

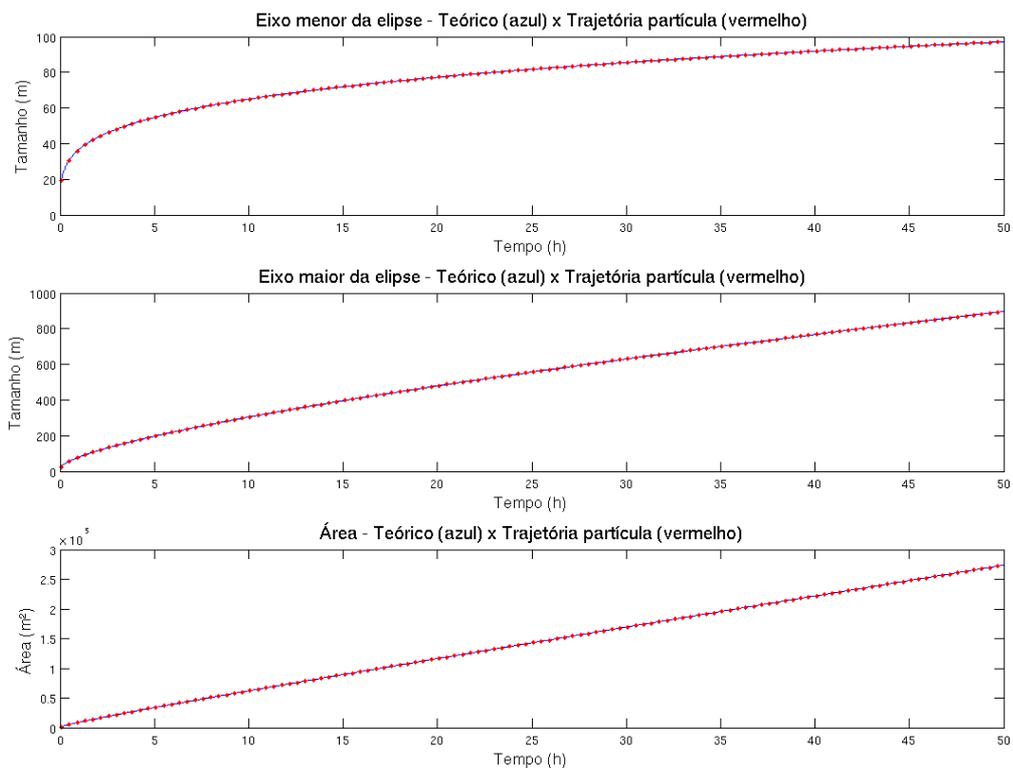


Figura 22. Comparação entre a teoria e a simulação dos eixos da área elíptica da mancha de óleo para um volume de $1,5 m^3$ de óleo.

É possível que uma contra-argumentação afirme que as condições ambientais, como corrente marinha e vento, sejam mais influente na dispersão do poluente na área de estudo que o processo de espalhamento. Todavia, visto que a maioria dos modelos matemáticos possui suas limitações, como a teoria de Fay (1969), a não consideração ou calibração de detalhes como a área inicial faz com que se tenha menor capacidade de previsão do comportamento do óleo em ambiente marinho. O trabalho de Reed *et al.* (1999), os quais revisam o estado da arte da modelagem de óleo, corrobora esta ideia ao relatarem que uma das preocupações futuras é a necessidade de mais pesquisas para o entendimento mais abrangente dos processos que ocorrem no óleo, destacando que não há uma compreensão completa deste poluente em águas marinhas.

Para uma melhor averiguação da sensibilidade da equação 58, foram feitos testes com outros volumes de derrame, estes de $10 m^3$, $50 m^3$ e $100 m^3$. As Figuras 23, 24 e 25 são encontradas a comparação temporal da área teórica e simulada, bem como o confronto destas áreas.

Pode-se perceber pela análise das Figuras 23, 24 e 25 que com o aumento do volume de óleo, a eficácia de previsão do crescimento da mancha diminui. Entretanto, esta diminuição não é agravante a simulação porque, observando as equações da regressão linear, o coeficiente de correlação permaneceu alto, acima dos 0,8, significando uma boa representação da teoria.

Uma vez estabelecido os testes de a fim de saber a taxa de aumento da mancha de óleo, é apresentado pelas Figuras 26 e 27 a expansão da mancha para um derrame instantâneo de $1,5 m^3$ de óleo na baía hipotética da Figura 19.

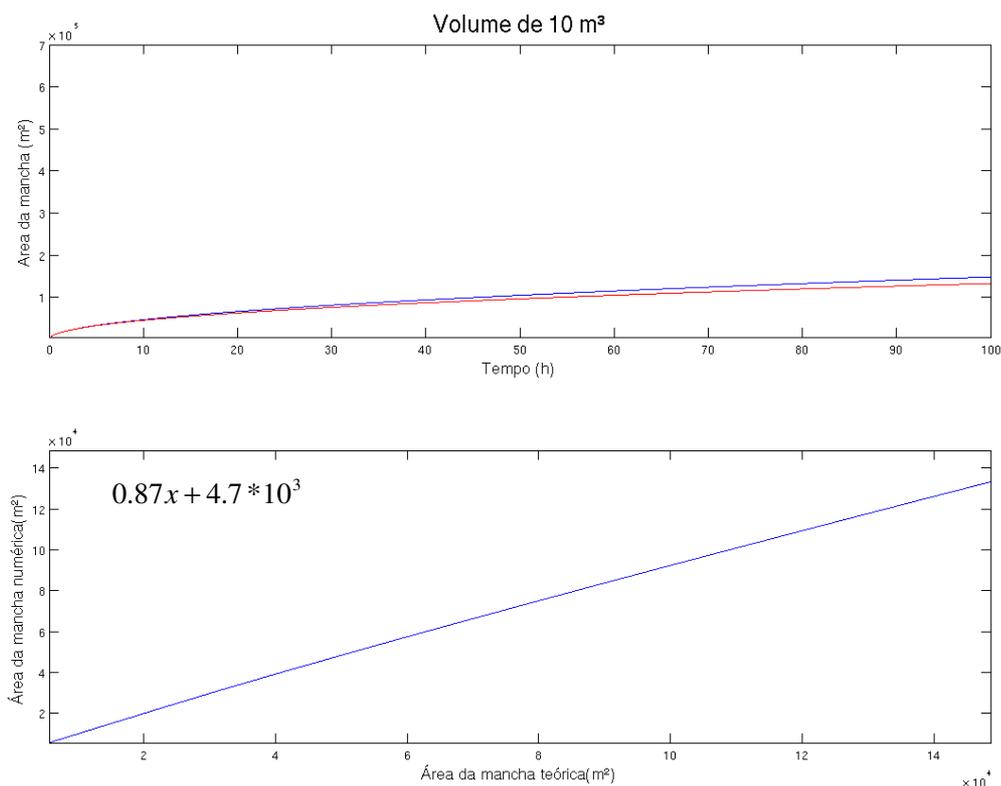


Figura 23. Comparação entre a teoria e a simulação da área da mancha de óleo para um volume de $10 m^3$ de óleo.

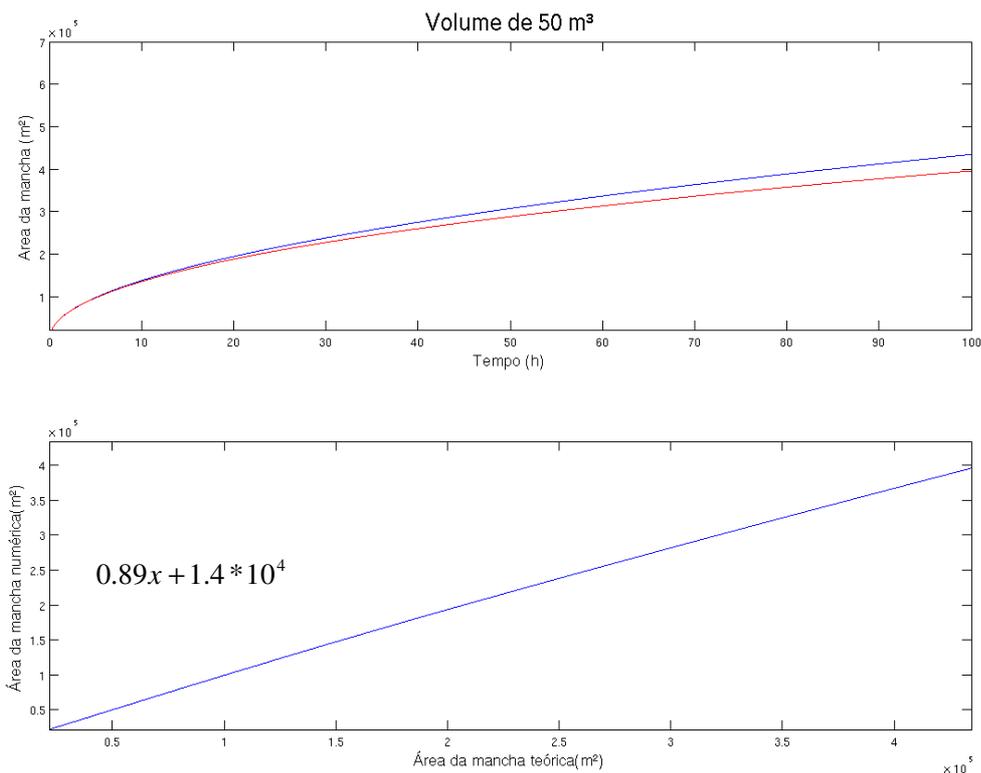


Figura 24. Comparação entre a teoria e a simulação da área da mancha de óleo para um volume de 50 m³ de óleo.

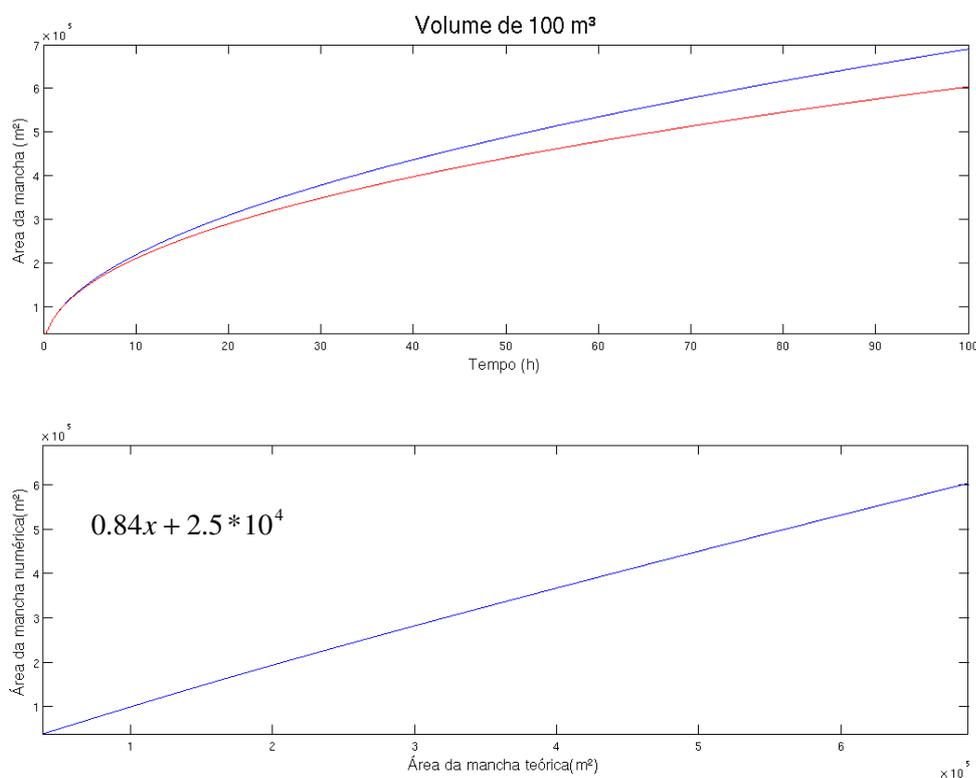


Figura 25. Comparação entre a teoria e a simulação da área da mancha de óleo para um volume de 100 m³ de óleo.

Pode-se observar pela análise das Figuras 26 e 27 que com a evolução do processo de espalhamento, a mancha de óleo aumenta o seu tamanho e as partículas se deslocam simetricamente formando um círculo (na condição sem vento) e axissimetricamente formando uma elipse (na condição influenciada pelo vento), em concordância com a teoria de Lehr.

Analisando os resultados das Figuras 21, 22, 26 e 27 é possível ver a importância do vento no aumento da mancha de óleo. A diferença do tamanho da área da mancha entre a situação de ausência e presença de vento é de 10 vezes. É destacado que essa diferença entre as áreas é para uma situação de pequeno volume de $1,5 m^3$ e de fraca velocidade do vento de $1 m/s$. Caso aumentasse o volume e a intensidade do vento, esta diferença tenderia aumentar mais. Isto mostra que somente considerar a teoria de Fay (1969) traria uma baixa capacidade de previsão do espalhamento do óleo, como mostrou o próprio estudo de Lehr *et al.* (1984).

Outro item importante a ser observado é a progressão da razão entre ΔQ e Q e entre ΔR e R , pois esses valores são determinantes no deslocamento da partícula. Esta análise se deve pelo fato que no presente modelo não foi inserido um tempo ou espessura terminal para cessar o efeito do espalhamento, da forma que é inserido em outros modelos, como o ADIOS e o OSCAR.

Para tal fim de análise, utiliza-se o teste do derrame instantâneo de $1,5 m^3$ de óleo na baía hipotética com diferentes velocidades do vento ($1, 5$ e $10 m/s$). Pela análise dos resultados que são mostrados nas Figuras 28 e 29 é averiguado que nas primeiras horas, principalmente a primeira hora, as partículas experimentam um maior deslocamento devido ao processo de espalhamento e vai diminuindo com o tempo até alcançar às 10 horas de simulação. Após esse ponto da simulação, a variação das razões $\Delta Q/Q$ e $\Delta R/R$ é muito pequena, atingindo valores próximos a zero com 100 horas de modelagem.

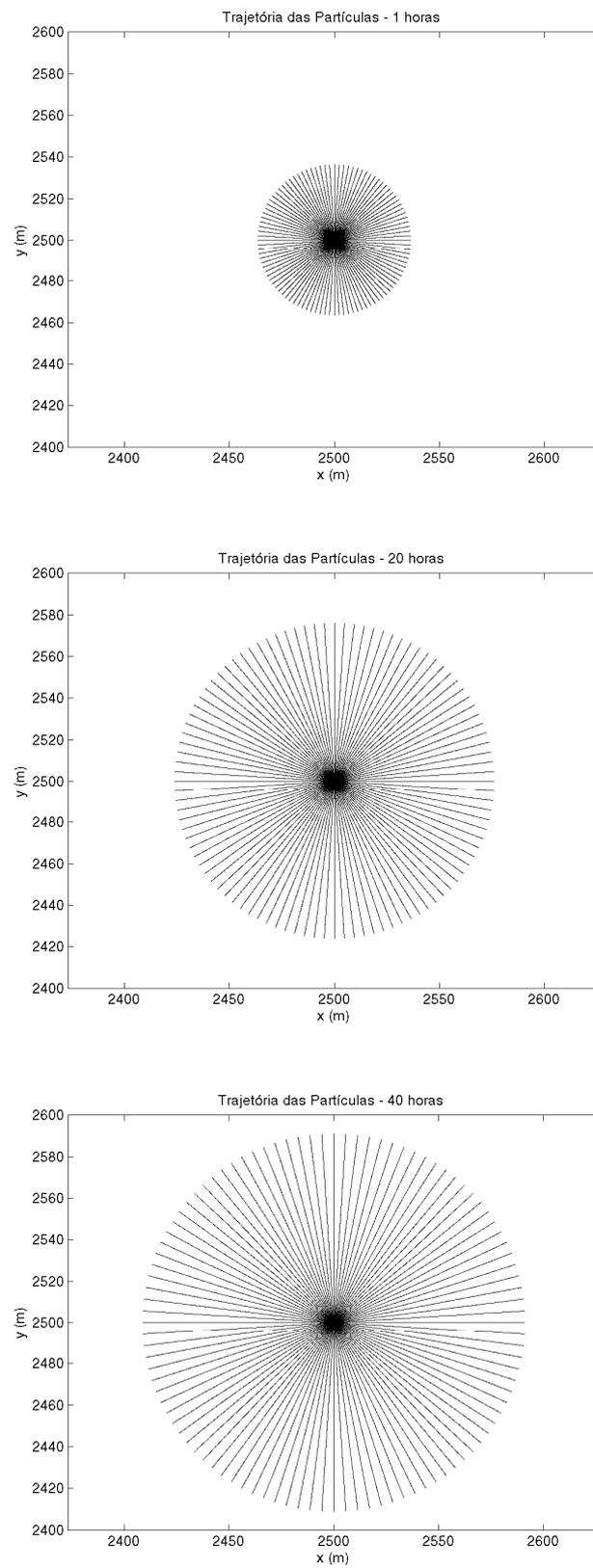


Figura 26. Evolução do espalhamento de 50 mil partículas sem vento atuante na mancha de óleo para um volume de $1,5 \text{ m}^3$ de óleo.

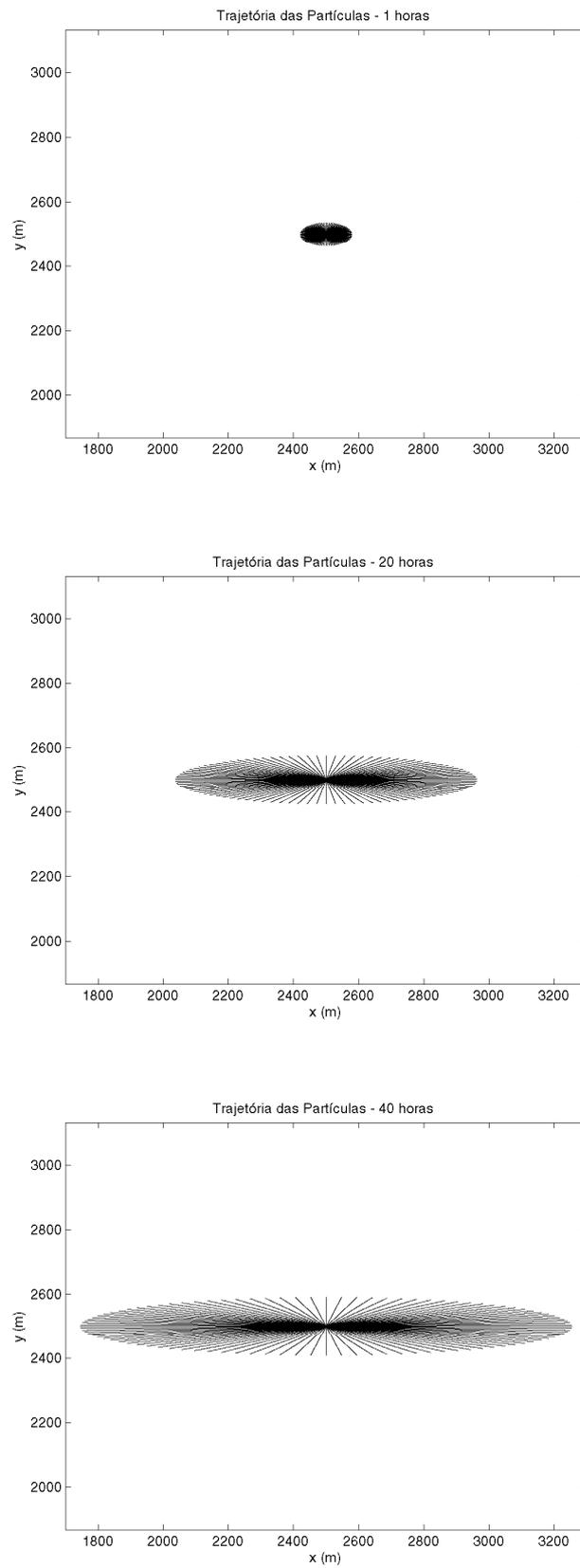


Figura 27. Evolução do espalhamento de 50 mil partículas com um vento de 1 m/s atuante na mancha de óleo para um volume de $1,5 m^3$ de óleo.

Os resultados das Figuras 28 e 29 estão em concordância com o tempo de duração do processo de espalhamento mostrado na Figura 6, bem como nas revisões dos processos do óleo realizados por ASCE (1996) e ITOPF (2002), onde a importância do espalhamento após 100 horas do derrame do óleo passa ser bem menor que nas primeiras horas, sendo outros fatores mais importantes.

Com relação ao resultado com diferentes intensidades do vento (Figura 29), atenta-se que para maiores valores de velocidade, maior deslocamento as partículas sofrem. Porém, esse padrão é visto somente até as 10 horas de simulação, sendo que após esse tempo é indiferente a magnitude da velocidade.

Desta forma, com esses resultados das Figuras 28 e 29, não é necessário utilizar a técnica de espessura terminal para encerrar o processo do espalhamento, pois à medida que tempo transcorre, a influência do espalhamento diminui. Segundo Reed *et al.* (1999), sobre condições naturais, o espalhamento do óleo não irá cessar quando a espessura terminal é alcançada. Neste ponto, o óleo tenderá a quebrar-se em pequenas manchas (*patches*) e estes irão espalhar devido à turbulência. Assim, não é necessário adotar tal medida para que o espalhamento pare de atuar sobre as partículas do óleo.

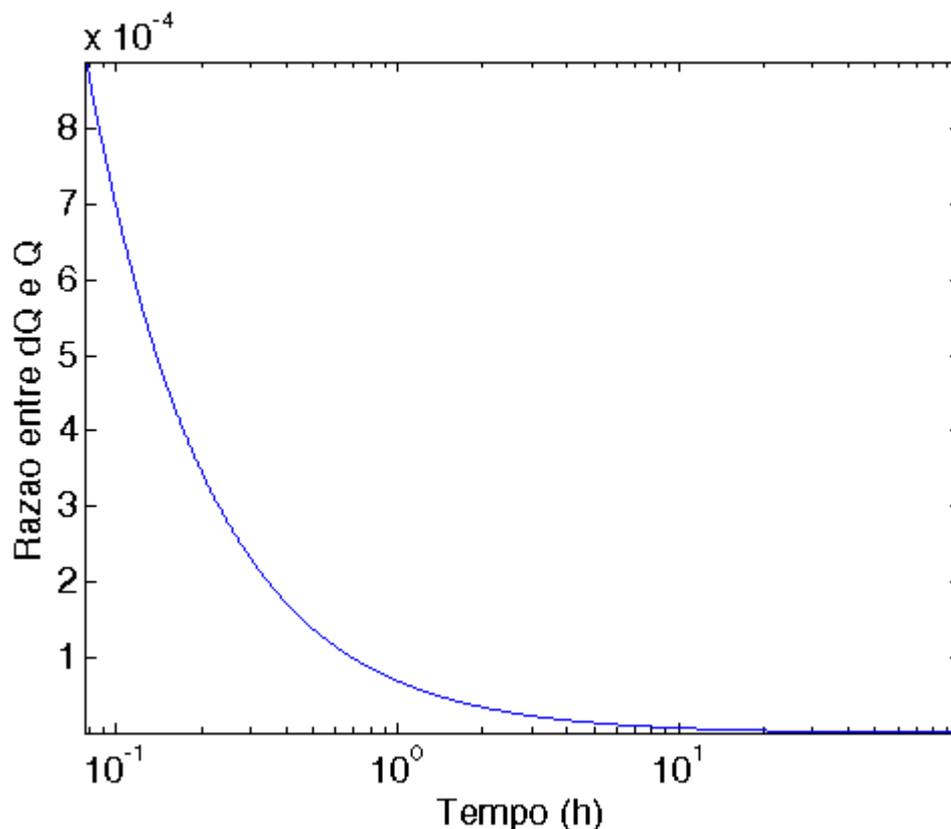


Figura 28. Progressão da razão entre ΔQ e Q com o tempo de simulação.

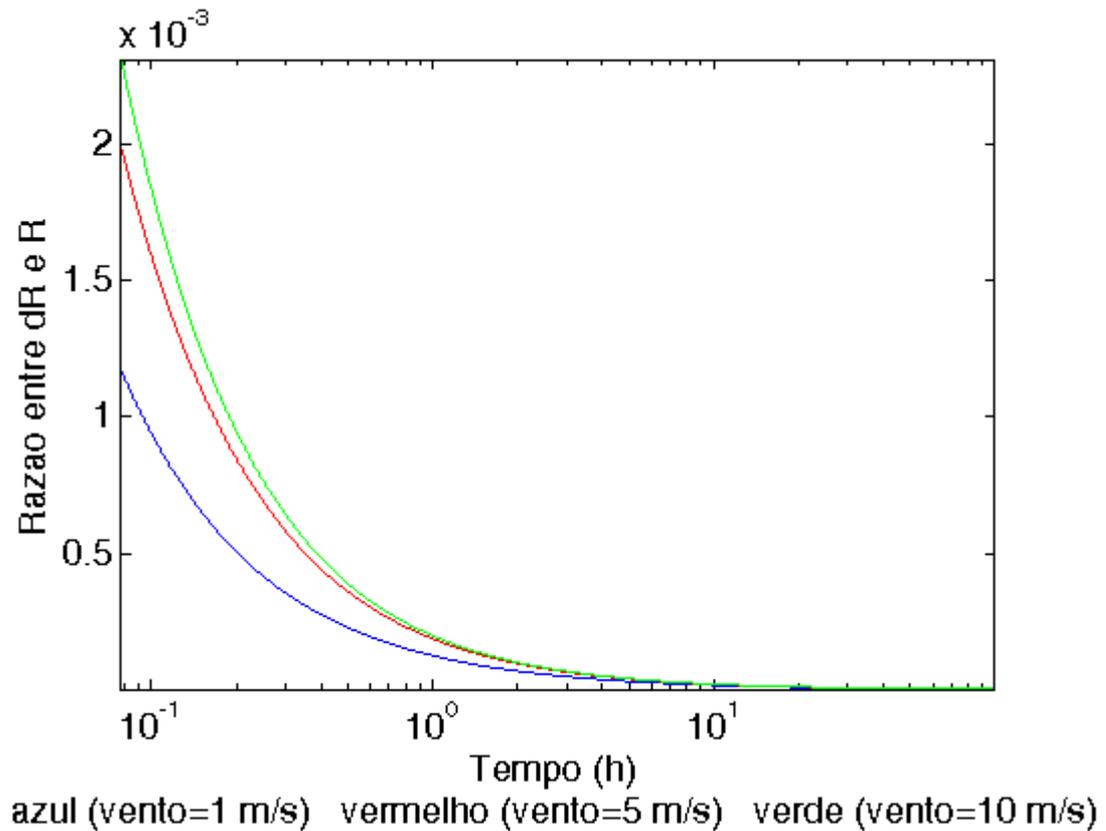


Figura 29. Progressão da razão entre ΔR e R com o tempo de simulação.

5.2.5 Testes realizados do algoritmo de cálculo de área

O algoritmo de cálculo de área da mancha de óleo apresentado na seção 3.3.6 é testado com a finalidade de averiguar a metodologia aplicada. É utilizada a mesma baía de hipotética da Figura 19, sem hidrodinâmica, sem a influência do vento e somente o processo do espalhamento, sendo que as malhas utilizadas possuem 1, 5, 10, 25 e 50 m de discretização espacial e são lançadas 10 mil partículas instantaneamente que representam $1,5 m^3$ de óleo. A Figura 30 apresenta o resultado do teste após 50 h de simulação.

Com a evolução do tempo da simulação, é observado que as malhas computacionais mais grosseiras (10, 25 e 50 m) distanciam da curva teórica de Lehr *et al.* (1984a), superestimando a área da mancha de óleo. Tal problema de superestimação também foi encontrado por Fernandes (2001) que também utilizava a técnica de contagem de células que contém partículas. Este autor afirma que se a malha de cálculo é muito grosseira para o volume derramado, serão encontrados valores muito elevados da área. Um exemplo simplista é

ilustrado na própria Figura 4 da seção 3.3.6 onde mostra que uma única partícula magnifica sua área ao ser representa por toda uma célula, resultando em uma área calculada superior à área da mancha.

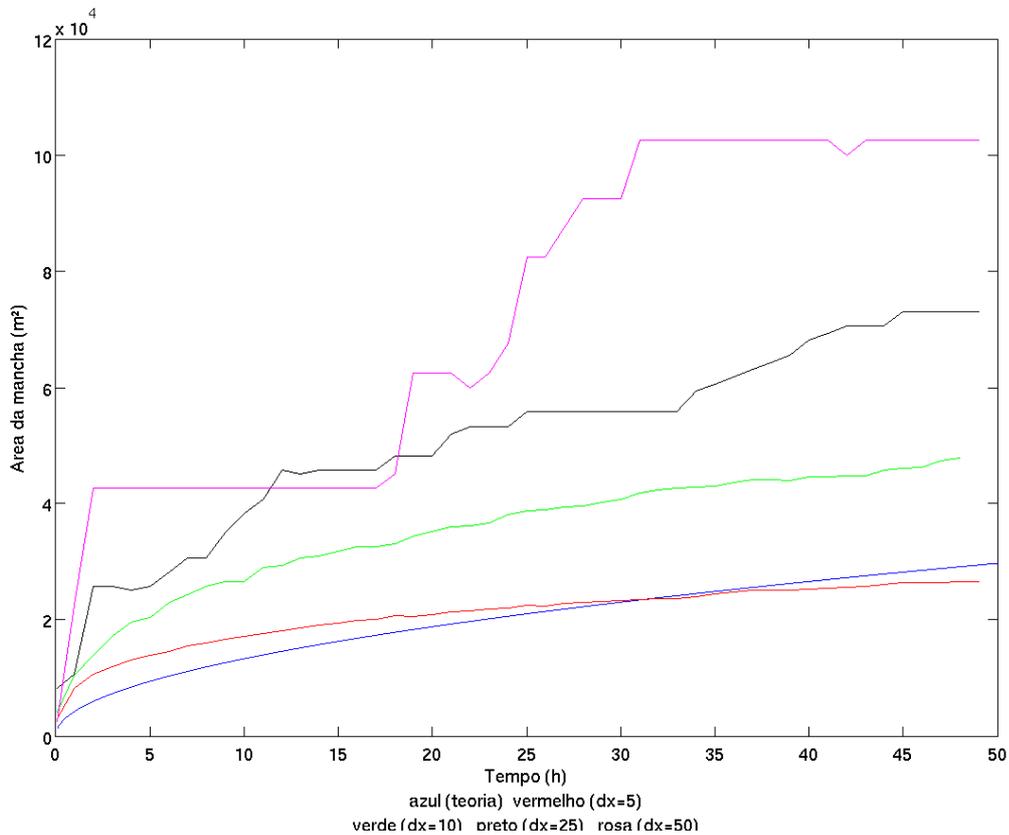


Figura 30. Área da mancha de óleo para diferentes tamanhos de malhas computacionais.

Ainda sobre os resultados mostrados na Figura 30, a malha mais refinada, com espaçamento de 5 m, corresponde bem à área teórica, ratificando de que maior refinamento da malha espacial melhor representatividade da área. No caso do MLPDA, um fato importante que a malha utilizada no cálculo da área, está vinculada com a malha euleriana onde se obtém os dados estatísticos da hidrodinâmica. Assim, existe uma relação em que quanto maior a discretização do domínio, maior tempo real é gasto para se simular. Dessa forma, uma forma de solucionar este problema é desvincular a malha do modelo euleriano para o cálculo da área da mancha, para que se tenha um ganho de precisão na estimativa do tamanho da área, sem um alto custo computacional do modelo euleriano.

6 APLICACÃO DE UM DERRAME HIPOTÉTICO DE ÓLEO NA BAÍA DO ESPÍRITO SANTO

6.1 ÁREA DE ESTUDO

O sistema estuarino da Grande Vitória é composto pela Baía do Espírito Santo, o Canal da Passagem e a Baía de Vitória (Figura 31). O movimento das águas deste complexo sistema estuarino é governado pela maré, tendo como principal componente a M_2 (componente lunar semi-diurna de período igual a 12,4 h). A Baía do Espírito Santo tem uma extensão aproximada de 5 km e alturas de marés de 40 cm a 160 cm na quadratura e sizígia, respectivamente, como observado em Rocha (2000).

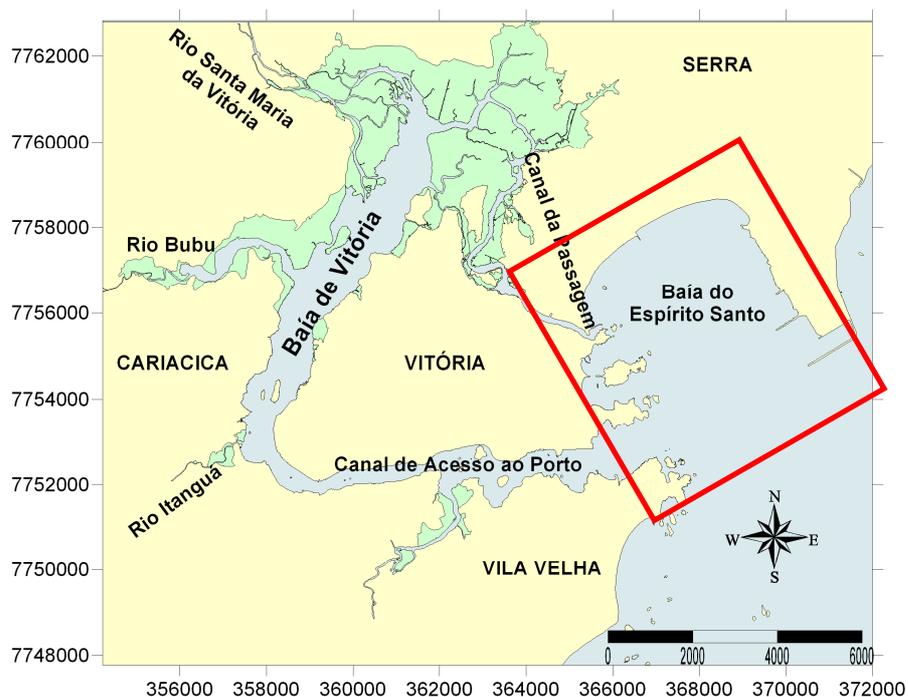


Figura 31. Representação do complexo estuarino na região da Grande Vitória. Em destaque (retângulo vermelho) a área de estudo.

Em relação a batimetria da região (Figura 32), Albino *et al.* (2001) aponta que a Baía do Espírito Santo apresenta moderada a baixa declividade, diminuindo a medida em que se aproxima da linha de costa. Uma região de destaque da área de estudo é o canal de acesso ao porto de Tubarão, local que apresenta as maiores profundidades.

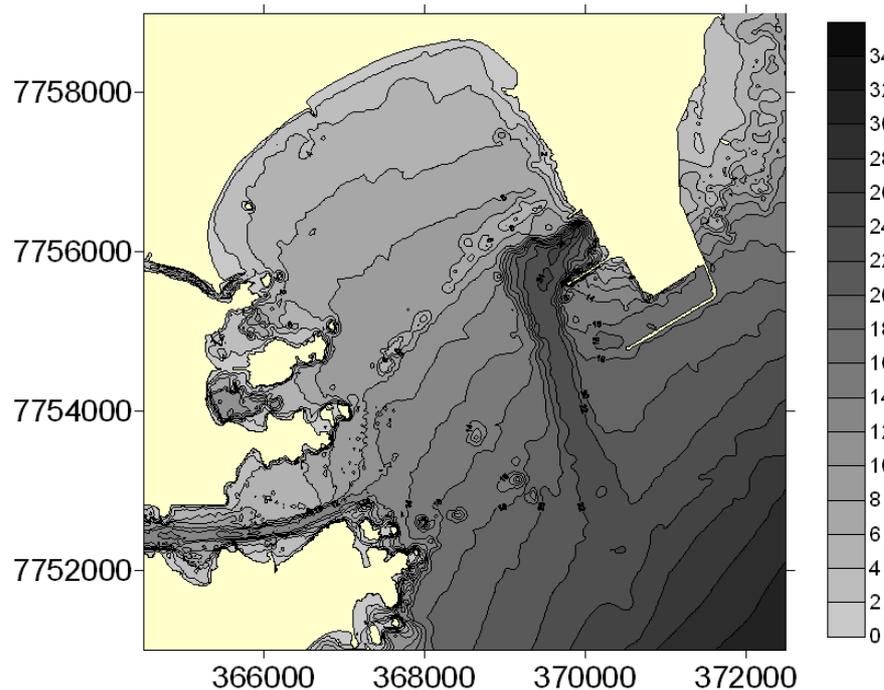


Figura 32. Mapa batimétrico da região da Baía do Espírito Santo. Origem dos dados: Labesul (2002).

6.2 MODELAGEM HIDRODINÂMICA

Em concordância ao Capítulo 2, esse trabalho utiliza o modelo numérico DIVAST como ferramenta para cálculo das propriedades estatísticas hidrodinâmicas (campo de velocidade) e os coeficientes de dispersão que são introduzidos no modelo lagrangiano de trajetória de partículas. É utilizada uma malha computacional composta por 630 células em x e 600 células em y (Figura 33) com discretização espacial de 25 metros, que abrange todo o sistema estuarino da ilha de Vitória e a Baía do Espírito Santo.

Nessa malha são empregadas três condições de contorno abertas: uma para o rio Santa Maria da Vitória (C1) e duas para a Baía do Espírito Santo (C2 e C3) (Figura 33). Para o contorno C1 foi atribuída condição de velocidade considerando uma vazão de $5 \text{ m}^3 / \text{s}$, e para C2 e C3 condições de elevação de maré. Entretanto, para C3 só há ocorrência de fluxo de massa, não a entrada da maré astronômica.

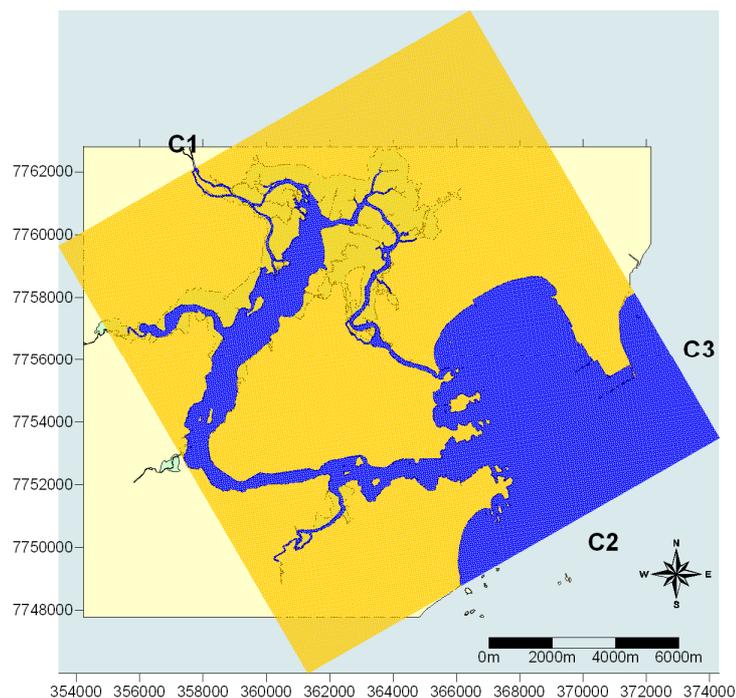


Figura 33. Representação da malha computacional de espaçamento 25 m x 25 m e as localizações dos contornos abertos utilizada no teste.

As Figuras 34 a 37 mostram os campos de velocidade em máxima de enchente para a região da Baía do Espírito Santo, com destaque para regiões do porto de Tubarão, entorno da ilha do Frade e canal da Passagem, e o canal de Acesso aos Portos da Baía de Vitória.

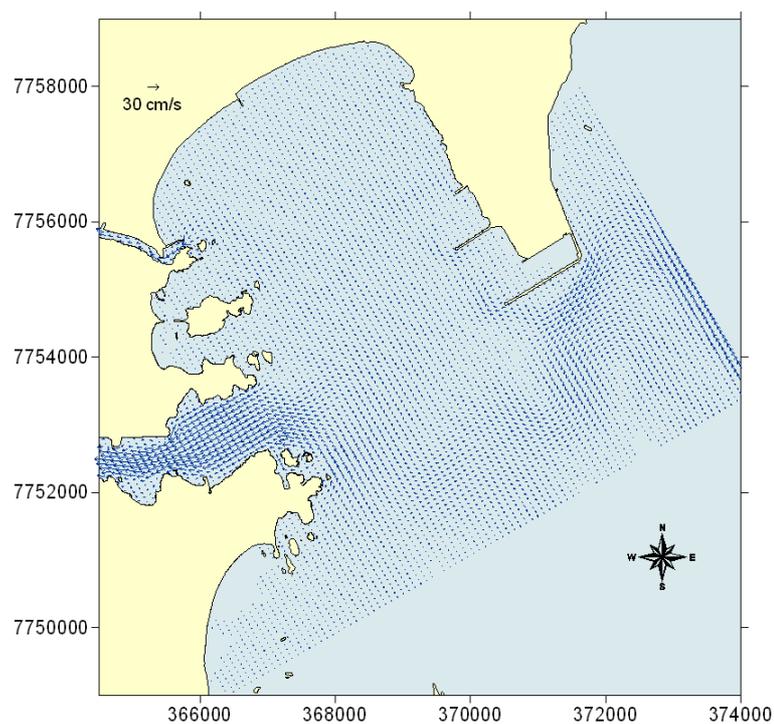


Figura 34. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para a Baía do Espírito Santo.

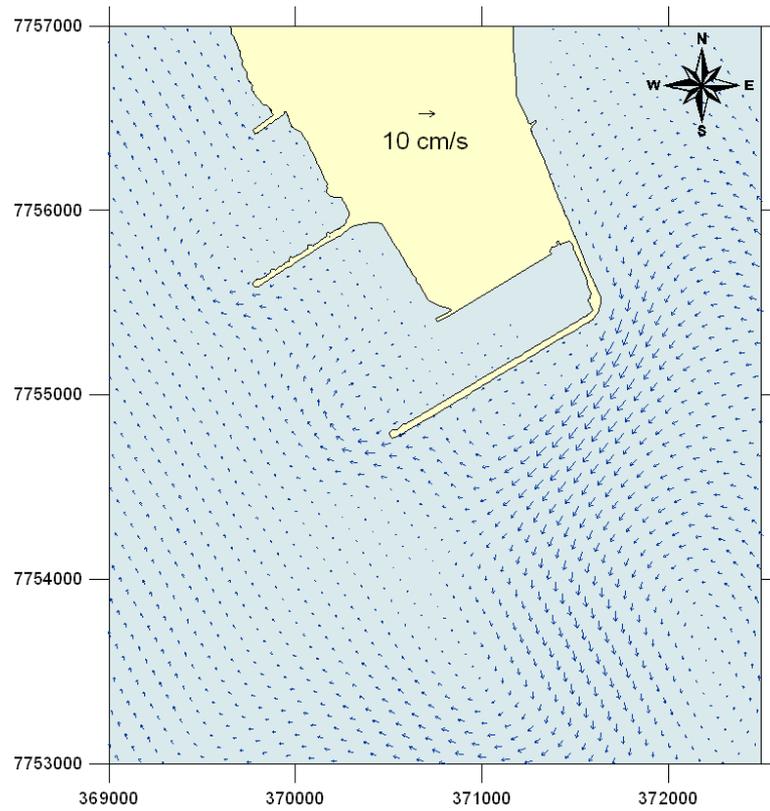


Figura 35. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para o porto de Tubarão.

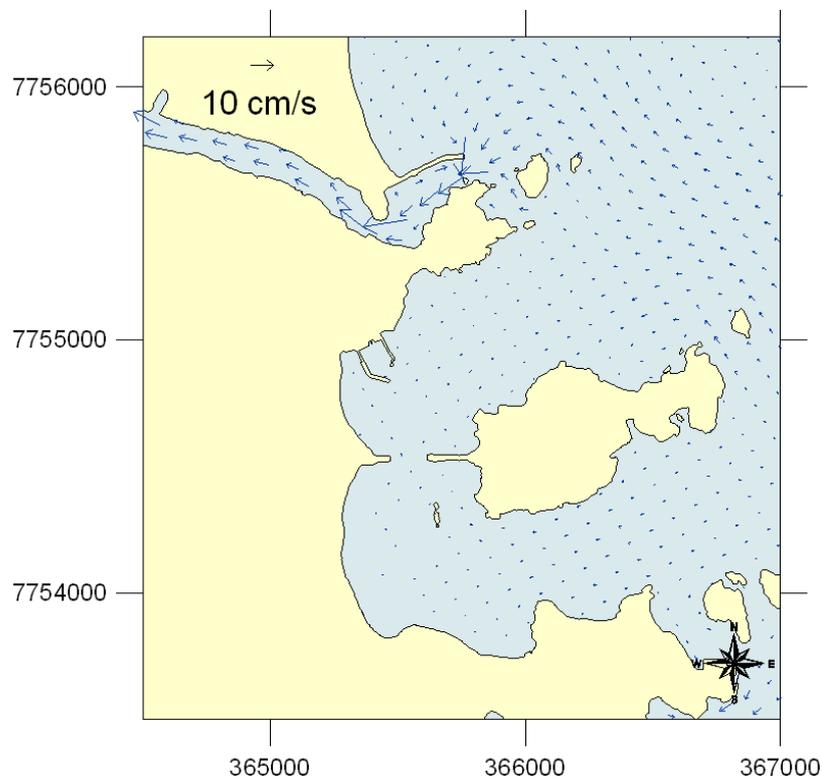


Figura 36. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para o canal da Passagem e entorno da ilha do Frade.

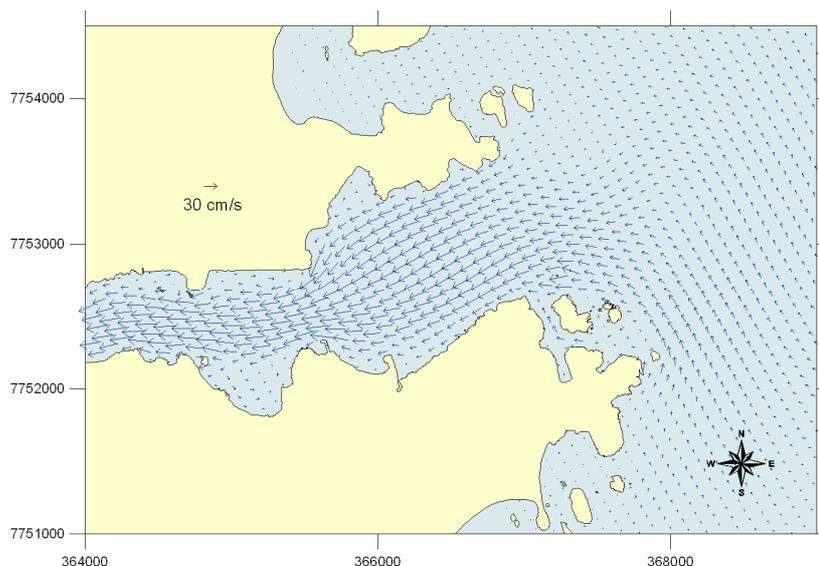


Figura 37. Campo de velocidade em situação máxima de enchente para o canal de Acesso aos Portos.

Uma análise da seqüência de imagens da Figura 34 a 37 revela que a maior parte da Baía do Espírito Santo possui baixa hidrodinâmica, com valores de velocidade inferiores a 10 cm/s. Os locais que são exceções a Baía com relação à hidrodinâmica, são as regiões com estreitamentos, como o Canal da Passagem (Figura 36) e o canal de Acesso aos Portos (Figura 37), onde as velocidades podem atingir valores superiores a 20 cm/s.

As Figuras 35 e 36 destacam ainda duas regiões com baixa hidrodinâmica, o entorno da ilha do Frade e a região do porto de Tubarão. O primeiro é particularizado por dois embaiamentos no entorno, ao norte e sul da ilha do Frade, onde é característico possuir baixas velocidades. O segundo apresenta um Porto de Tubarão com baixa hidrodinâmica, em que uma intensificação do escoamento nas pontas de seus píers pode ser conseqüência do cisalhamento com o contorno físico da corrente.

6.3 MODELAGEM DO DERRAME DE ÓLEO

O cenário escolhido para a aplicação da modelagem do derramamento hipotético de óleo na Baía do Espírito Santo é embasada no acidente real ocorrido com o navio Sarah Valleta no Porto de Tubarão (Figura 38) no ano de 1999. Nesse episódio, aproximadamente $1,5m^3$ de um óleo pesado (óleo combustível MF-180), de $11,7^\circ API$ e massa específica de $987,8kg/m^3$, é

derramado próximo as coordenadas $20^{\circ}17'31,2'' S$ e $40^{\circ}14'50,4'' W$ (PECDP, 2000 *apud* GAZE, 2009).

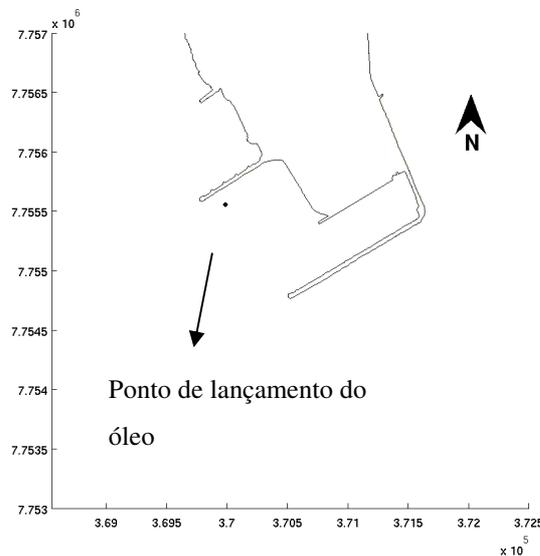


Figura 38. Localização do ponto de lançamento do óleo das partículas no porto de Tubarão.

É válido ressaltar que as simulações não almejam em reproduzir o acidente citado, visto que fatores ambientais, como o campo hidrodinâmico e o campo de vento, possuem outros valores comparados com o dia do acidente.

As simulações são fundamentadas em três cenários para a Baía do Espírito Santo: uma situação sem a ocorrência de vento e duas com os ventos mais predominantes. Para a determinação dos ventos mais predominantes é utilizado os dados de Albino *et al.* (2004) *apud* Piumbini (2009), os quais consistem de dados obtidos pela Estação Meteorológica da Companhia Siderúrgica de Tubarão (CST), entre 01 de janeiro de 1995 e 30 de julho de 1999 (Tabela 2).

Tabela 2. Dados de ventos obtidos na Estação Meteorológica da CST na região de Vitória – ES, entre janeiro de 1995 e julho de 1999. Fonte: Albino *et al.*, 2004 *apud* Piumbini (2009).

Direção	Ocorrência (%)	Velocidade Média (m/s)	Desvio Padrão
NE	36,24	2,56	1,12
E	15,44	3,09	1,16
S	7,55	2,51	1,63
SW	13,65	2,40	0,97
W	9,21	1,49	0,82
NW	8,20	1,18	0,60

A análise da permite verificar a predominância dos ventos do quadrante NE, seguida dos ventos do quadrante E. Portanto, essas direções de vento e suas respectivas médias de velocidade são utilizadas nos dois cenários de simulação.

Acrescenta-se a esses parâmetros, a desconsideração do processo de evaporação do óleo e o lançamento instantâneo de 50.000 partículas após 25 h do início da modelagem euleriana (DIVAST), com um passo de tempo lagrangiano de 1 s. Esse tempo de 25 h garante que o modelo hidrodinâmico atinja sua estabilidade numérica, visto que é importante aguardar pelo menos um ciclo de maré antes do lançamento das partículas.

Ainda na descrição dos testes, é dividida em setores as regiões entorno da Baía do Espírito Santo no sentido de auxiliar a identificação das mesmas (Figura 39). O setor I corresponde à praia de Camburi em toda sua extensão, até o píer de Iemanjá. O setor II abrange desde a saída do Canal da Passagem até a ilha do Boi, compreendendo a região da Praia do Canto, Ilha do Frade e a curva da Jurema. Já o setor III abrange toda a entrada do canal de Acesso aos Portos da Baía de Vitória. Por último, o setor IV, corresponde ao município de Vila Velha, desde o farol de Santa Luzia até a Praia da Costa.

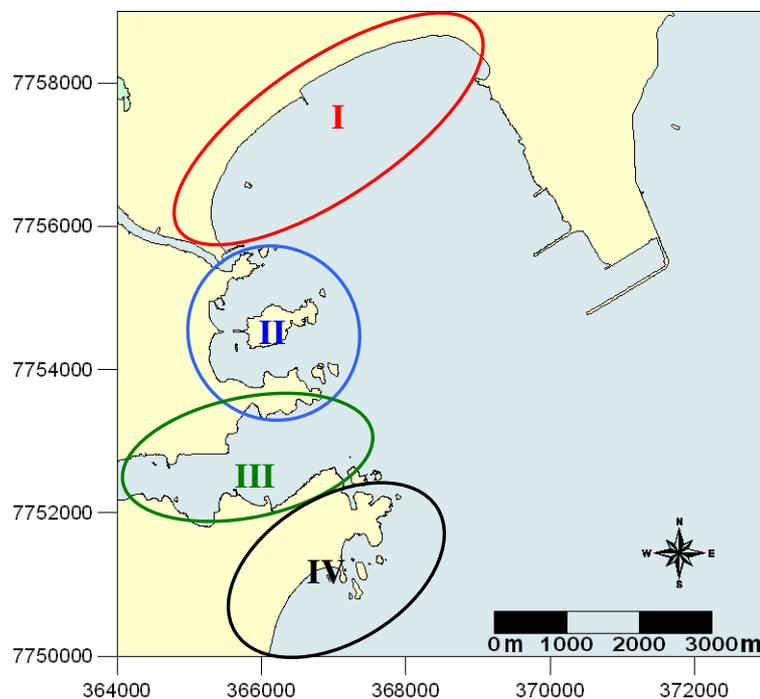


Figura 39. Divisão em setores da Baía do Espírito Santo.

6.3.1 Cenário um

O cenário um representa condição com ausência de vento, onde são lançados 50 mil partículas duas horas antes da preamar, tendo o ponto de referência o Porto de Tubarão. Os resultados da simulação realizada para este cenário são à frente apresentados. As primeiras horas do derrame hipotético de óleo são mais detalhadas por ser o período no qual o processo físico de espalhamento influencia mais o movimento das partículas. O conjunto de imagens das Figuras 40 e 41 representam a evolução no plano espacial-temporal da mancha de óleo.

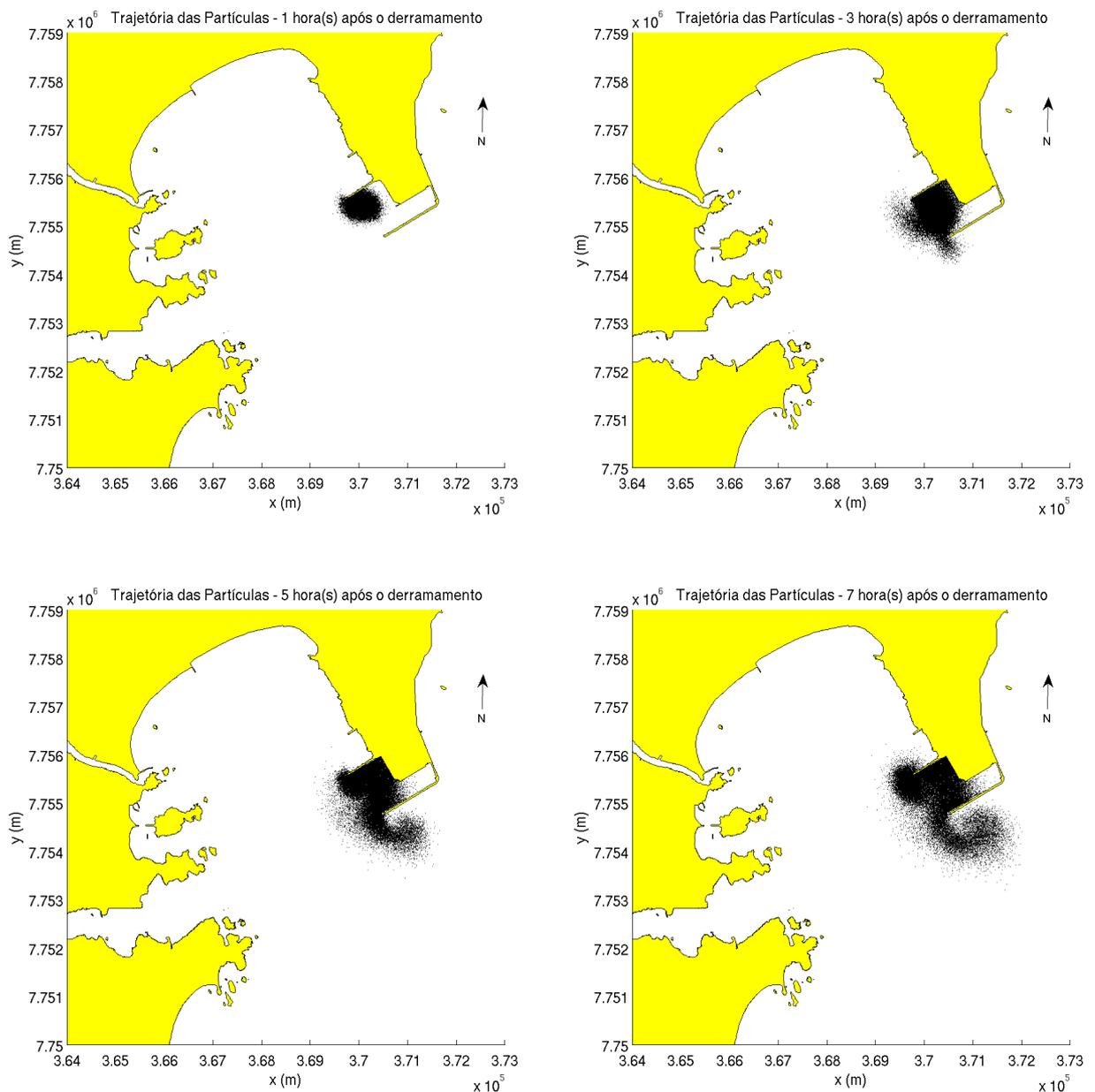


Figura 40. Cenário um: instantes 1, 3, 5 e 7 horas após o derrame na área de estudo.

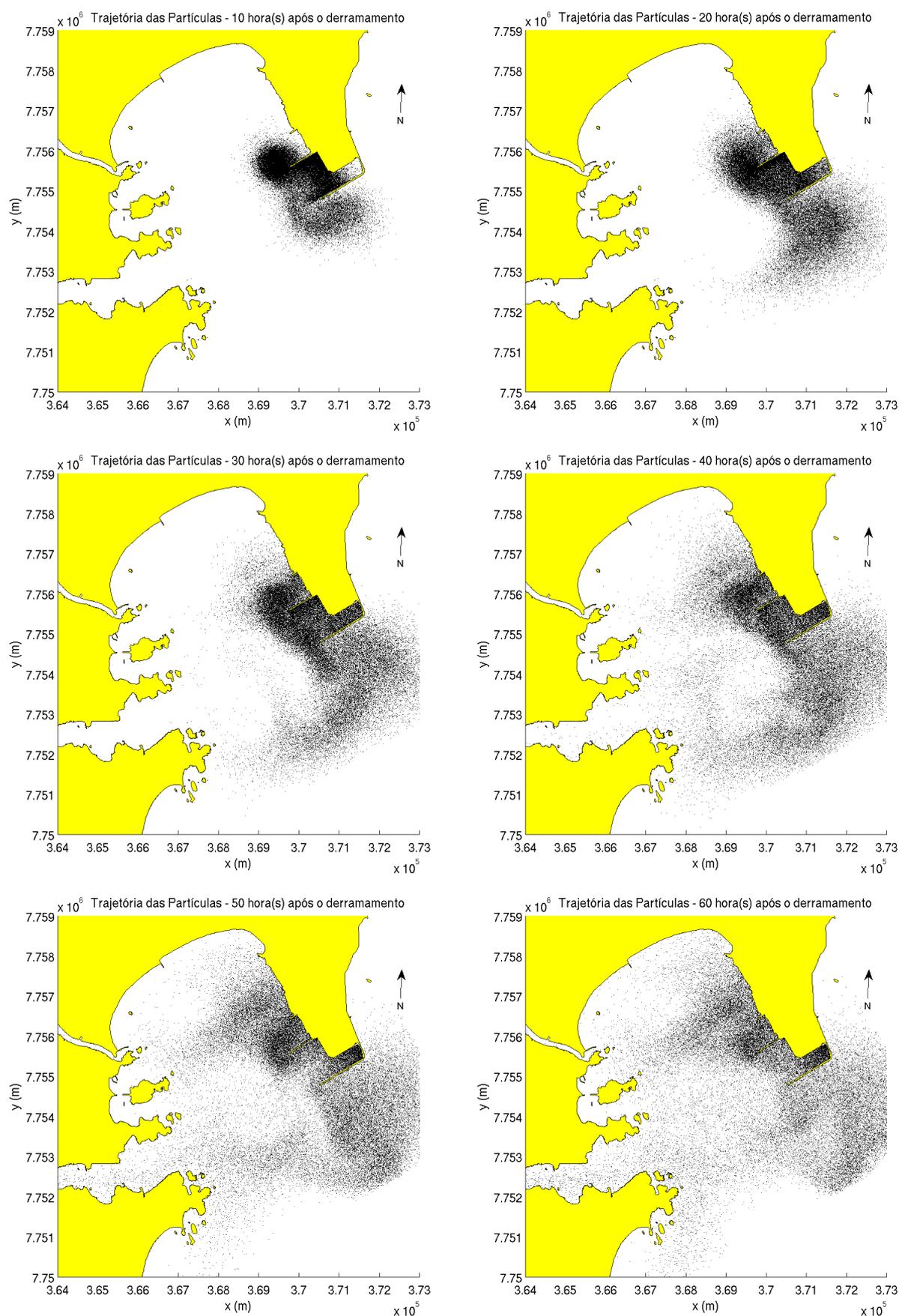


Figura 41. Cenário um: instantes 10, 20, 30, 40, 50 e 60 horas após o derrame na área de estudo.

A análise por meio das Figura 40 e 41 percebe-se que grande parte das partículas lançadas ainda permanece no interior do porto de Tubarão depois de transcorrido 60 h de simulação. Essa percepção é aliada com a Figura 35 e indica que a baixa hidrodinâmica naquela região do Porto de Tubarão provoca essa retenção das partículas, dificultando a saída para região mais central da Baía do Espírito Santo.

Uma vez que parte das partículas se desvencilha da baixa hidrodinâmica do porto, após as 5 h de simulação, elas passam a ser carregadas pelas correntes originadas pela maré. Uma parte dessas partículas seguem para fora da Baía de Espírito Santo no período de vazante (hora 5 e 7 da Figura 40), enquanto a outra parte avança em direção a praia de Camburi com a maré enchente (hora 10 da Figura 41). Já após as 60 h de simulação, com o movimento originado pela maré aliado a difusão e o espalhamento, as partículas se dispersam por todas as regiões da baía, adentrando o canal de Acesso aos Portos e chegando a Praia da Costa em Vila Velha.

Ao se comparar esses resultados com os obtidos por Gaze (2009), é observado que não há grandes divergências do comportamento da mancha de óleo na Baía do Espírito Santo, onde este autor afirma “que parte da mancha forma uma espécie de cauda que serpenteia em direção à saída a sudeste da Baía”, como observado também no presente estudo. A principal diferença reside que uma parte da mancha do óleo da simulação de Gaze (2009) não avança em direção a praia de Camburi, destoando dos resultados aqui obtidos.

6.3.2 Cenário dois

O cenário dois é destacado por ter o vento mais característico da região (vento de nordeste – velocidade média de $2,56 \text{ m/s}$) influenciando o movimento das partículas de óleo. De forma análoga ao cenário um, são lançados 50 mil partículas duas horas antes da preamar, tendo o ponto de referência o Porto de Tubarão. Os resultados da simulação realizada para este cenário são apresentados nas Figuras 42 e 43.

Os resultados mostrados nas Figuras 42 e 43 nota-se que diferentemente que aconteceu no cenário um, onde a baixa hidrodinâmica do porto de Tubarão aprisionou as partículas lançadas, o vento atuante carrega a mancha de óleo diretamente para o canal de Acesso aos Portos e Vila Velha, nas localidades do farol de Santa Luzia e Praia da Costa. A mancha ainda atinge uma parte da ilha do Boi, na região da ilhas Galhetas e da curva da Jurema (Setor II).

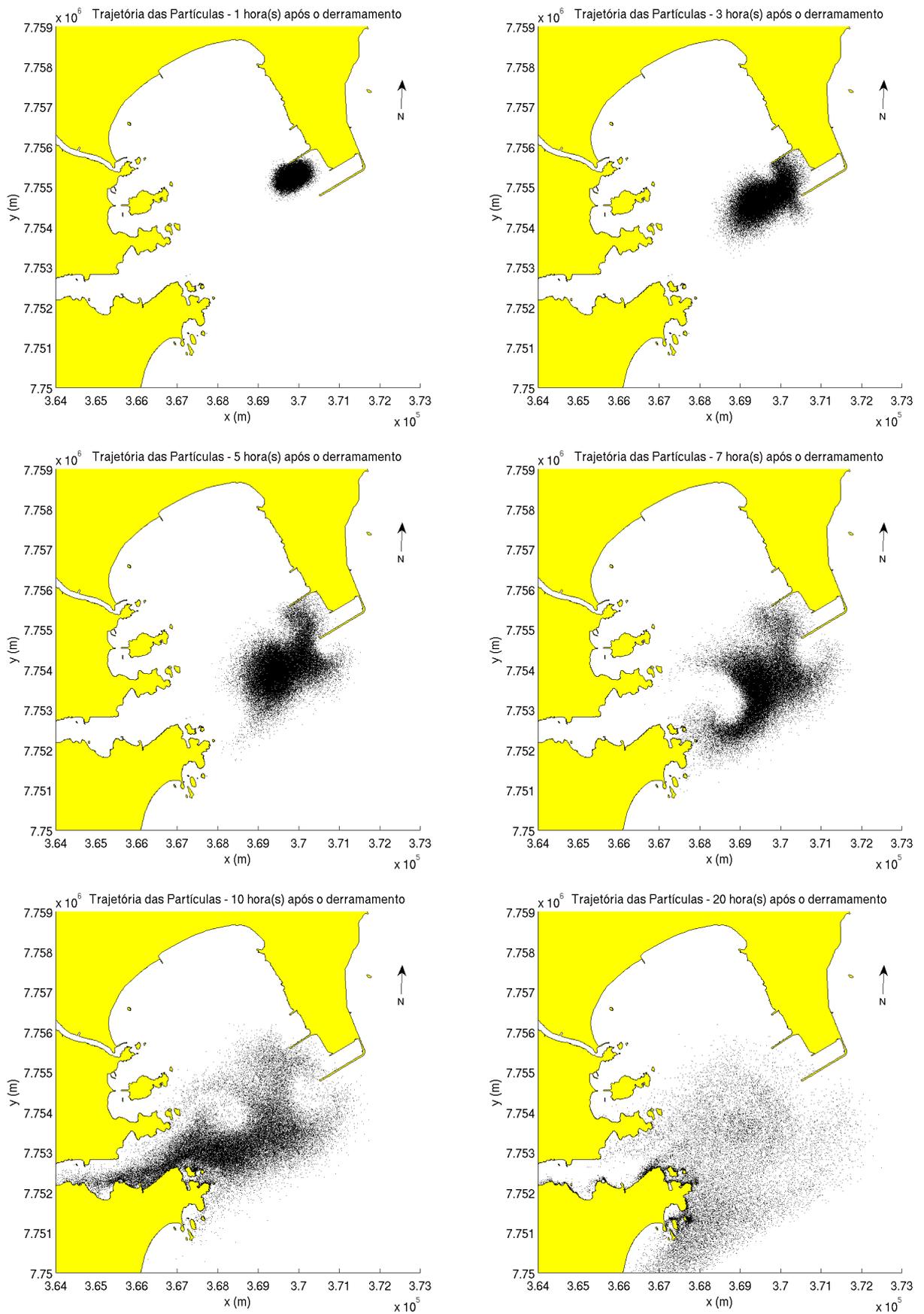


Figura 42. Cenário dois: instantes 1, 3, 7, 10 e 20 horas após o derrame na área de estudo.

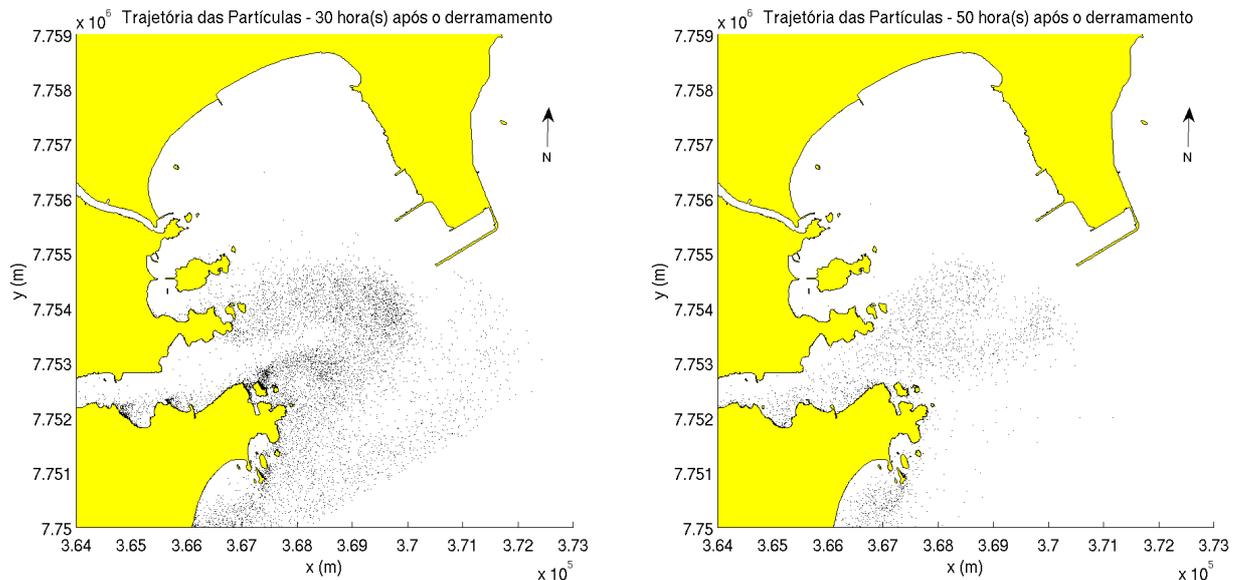


Figura 43. Cenário dois: instantes 30 e 50 horas após o derrame na área de estudo.

Para alcançar essas localidades, as partículas de óleo precisaram pouco mais que 9 h, destacando a influência que o vento tem sobre o transporte do óleo derramado. A mancha inicia com um formato elíptico em suas primeiras horas, caminhando em direção a região central da Baía do Espírito Santo e no mesmo sentido do vento. Com as inversões do movimento da corrente de maré, a mancha faz um ziguezague até, às 9 h, entrar no canal de Acesso aos Portos com a combinação vento nordeste-maré enchente.

Ao avançar na simulação, a quantidade de partículas de óleo na Baía vai se tornando irrisório, sendo as partículas cada vez mais lançadas sobre a Baía de Vitória e o município de Vila Velha. As partículas que adentram o setor II, na localidade da curva da Jurema, não conseguem sair do embaiamento devido sua abertura está voltada para nordeste, justamente a direção do vento, e por essa região ser caracterizado por baixo hidrodinamismo.

A distribuição das partículas no instante 50 h (Figura 43) deste cenário difere em sua totalidade com o apresentado no cenário um, onde as partículas estavam dispersas por toda Baía. O transporte implicado pelo vento ao óleo e sua relação com o processo de espalhamento surge como um fator determinante na análise do comportamento e destino deste poluente, onde a desconsideração desta força, pouco precisaria um resultado fidedigno.

6.3.3 Cenário três

O cenário três corresponde a um cenário com vento vindo de leste (velocidade média de $3,09 \text{ m/s}$), onde segundo Albino *et al.* (1999) *apud* Piumbini (2009), é o segundo mais presente na área de estudo. De mesma forma que nos outros dois cenários, são lançados 50 mil partículas duas horas antes da preamar, tendo o ponto de referência o Porto de Tubarão. A seguir é exposta a evolução do movimento das partículas na Baía (Figuras 44 e 45).

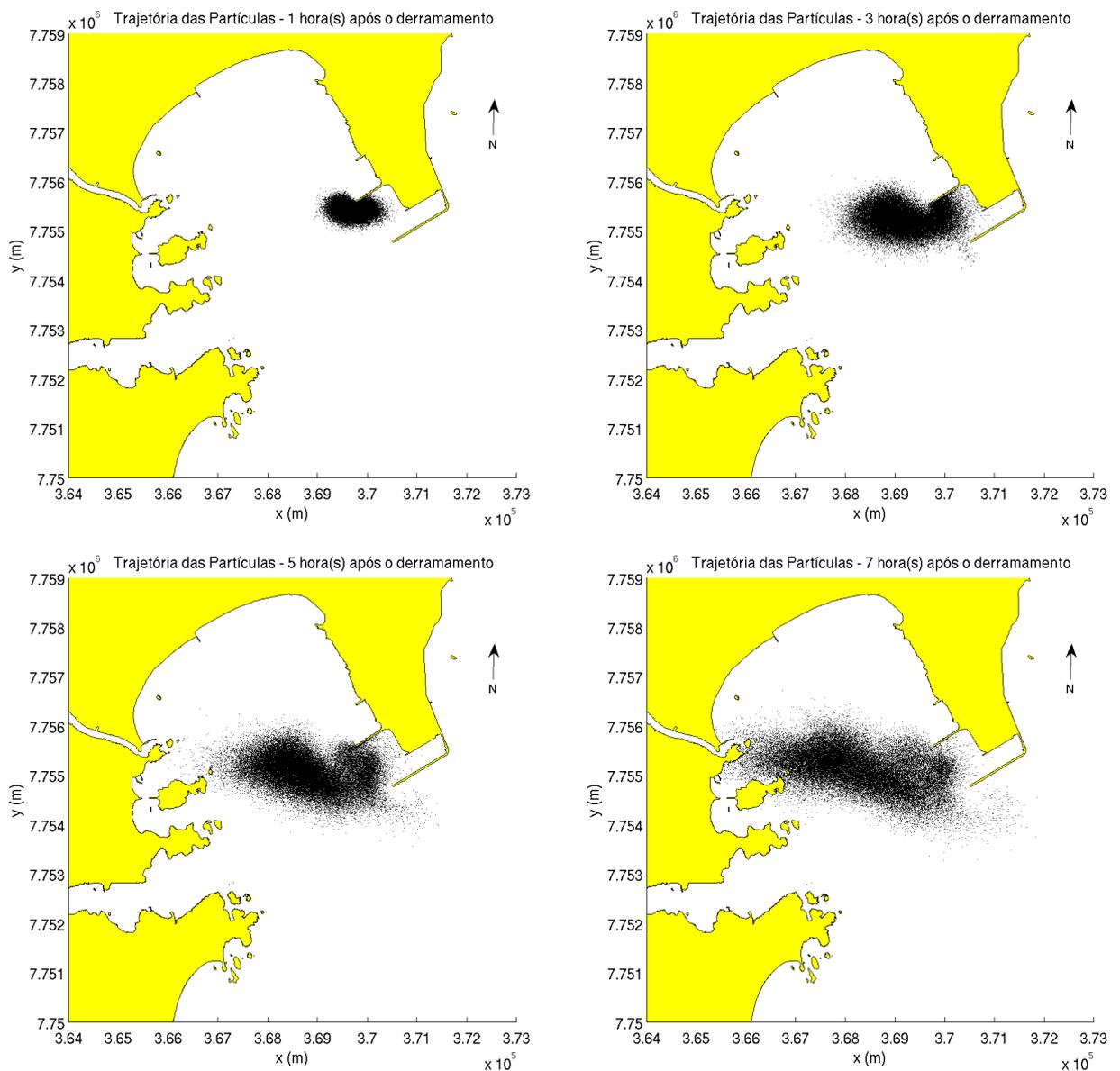


Figura 44. Cenário três: instantes 1, 3, 5 e 7 horas após o derrame na área de estudo.

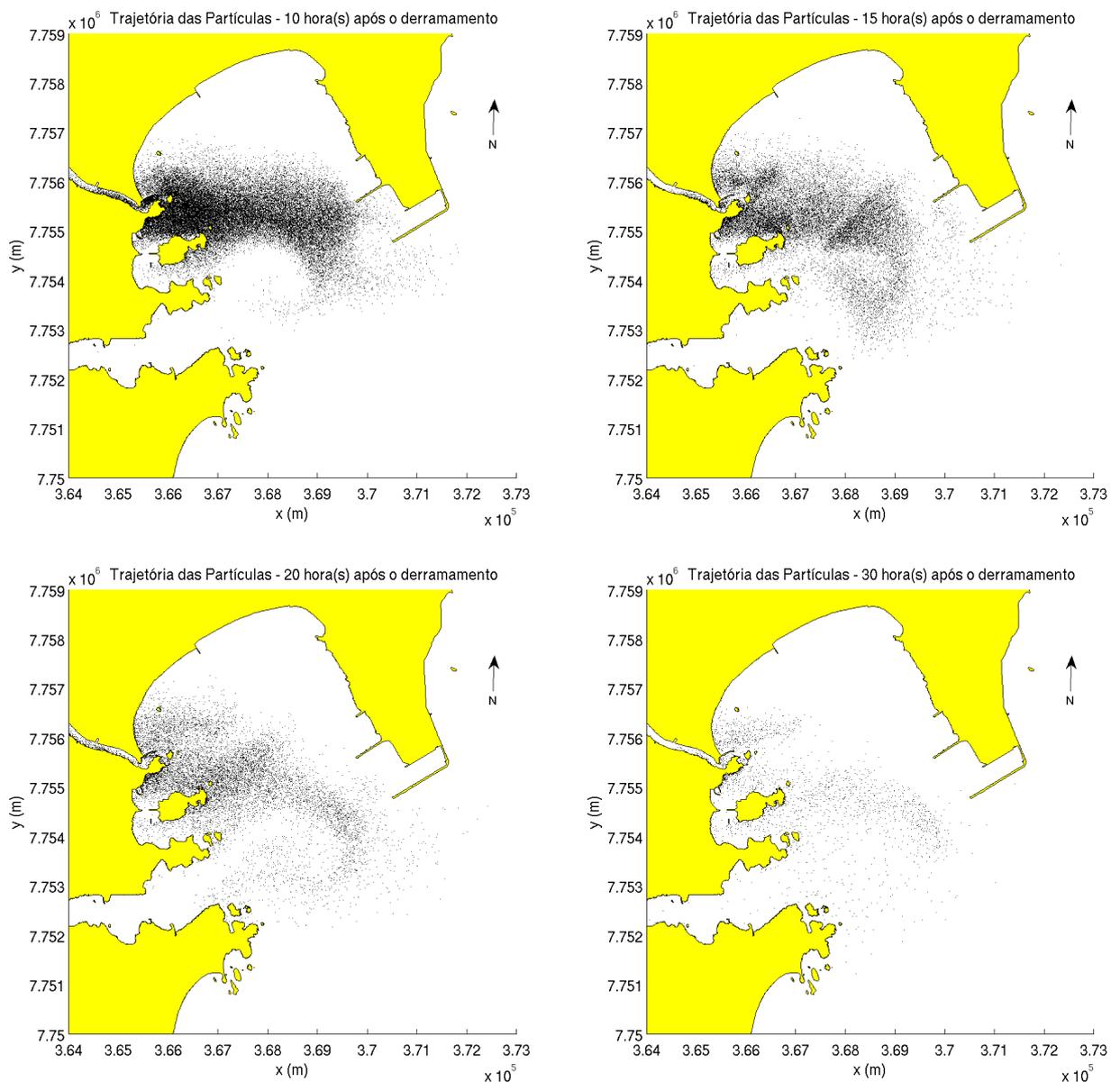


Figura 45. Cenário três: instantes 10, 15, 20 e 30 horas após o derrame na área de estudo.

Os resultados para este cenário (Figuras 44 e 45) se assemelha, a princípio, com os resultados apresentados no cenário dois, onde a mancha inicia com um formato elíptico e avança em direção a região central da Baía do Espírito Santo. Entretanto, como as direções do vento não são as mesmas, no presente cenário as partículas viajam diretamente para o setor II, alcançando todas as localidades desse setor, e atingem a região sudoeste da praia de Camburi no setor I.

Devido à maior magnitude ($3,09 \text{ m/s}$) e direção favorável do vento, o instante 6 h é o tempo transcorrido para as partículas atingirem a costa do setor II, sendo o menor tempo comparado com as outras simulações. O comportamento sinuoso da mancha também é verificado neste

cenário, onde com a maré enchente as partículas são levadas a região da Praia do Canto, próximo ao Iate Clube, e ingressam no canal da Passagem em grande volume.

Já no instante 50 h, a Baía do Espírito Santo quase não apresenta óleo em sua porção central, sendo presente predominantemente no embaiamento ao norte da ilha do Frade e no interior do canal da Passagem.

6.3.4 Resumo dos cenários

A união das informações do comportamento e localização da mancha de óleo com o tempo em que esta leva para atingir a costa, dá suporte a tomada de decisão e auxilia nos trabalhos de contenção deste poluente, para que se evite o alcance de áreas potencialmente vulneráveis. Em sequência, é mostrado o resumo dos resultados obtidos dos cenários simulados para cada setor da Baía do Espírito Santo (Tabela 3), com a intenção de facilitar a visualização geral.

Tabela 3. Tempo simulado nos diferentes cenários para a mancha de óleo alcançar à costa dos setores da Baía do Espírito Santo.

Cenário	Vento	Setor	Tempo (h)	1ª localidade atingida
I	Sem vento	I	50	Nordeste da praia de Camburi
		II	36	Entre a ilha do Boi e do Frade
		III	33	-
		IV	35	Farol de Santa Luzia
II	Nordeste 2.56 m/s	I	-	-
		II	10	Ilha do Boi
		III	9	-
		IV	8	Farol de Santa Luzia
III	Leste 3.09 m/s	I	8	Próximo ao píer de Iemanjá
		II	6	Ilha do Frade
		III	12	-
		IV	-	-

7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Os testes realizados provam que os algoritmos implementados para simular advecção pelo vento e do processo físico do espalhamento no modelo lagrangiano de partículas, bem como a distribuição das partículas de forma circular ou elíptica, corresponderam satisfatoriamente com a teoria. É ressaltado que a consideração errônea de uma área inicial pode implicar em uma superestimação ou subestimação da área da mancha somente devido ao processo de espalhamento.

O módulo de cálculo da área do modelo lagrangiano apresenta erros quando se aplica malhas computacionais com discretização espacial muito grosseira, como também verificado por Fernandes (2001). É importante conjugar o espaçamento das células da malha com o custo computacional para obter os melhores resultados, sendo uma alternativa a utilização de uma outra malha refinada que não seja do modelo hidrodinâmico.

Fundamentado nos resultados alcançados nas simulações, é demonstrado a serventia do modelo utilizado neste estudo como ferramenta de previsão e auxílio a contenção de derrames de óleo no mar, em especial na Baía do Espírito Santo, em diferentes cenários. As duas direções de ventos utilizados (nordeste e leste) mostram a vocação deste agente no transporte da mancha de óleo para a entrada dos canais do complexo estuarino da Grande Vitória.

A sugestão futura para os próximos trabalhos é a inclusão no MLPDA, de novos algoritmos que simulem outros processos físico-químicos atuantes na mancha de óleo em ambiente marinho, tais como emulsificação, dissolução e oxidação. Uma vez levando em consideração esses outros fenômenos, o modelo estará capacitado a processar, com maior eficiência, derramamentos de óleo em meio marinho.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGENDA 21. **CONFERÊNCIA DAS NAÇÕES UNIDAS SOBRE MEIO AMBIENTE DESENVOLVIMENTO**. Rio de Janeiro, 1992. Disponível em: <<http://www.mma.gov.br/port/se/agen21/ag21global/consulta.html>>. Acesso em 23 de julho de 2008.

AL-RABEH, A.; LARDNER, R.; GUNAY, N.; KHAN, R.; HOSSAIN, M.; REYNOLDS, R. M.; LEHR, W. J. On mathematical and empirical models for surface oil spill transport in the Gulf. **Marine Pollution Bulletin**, v. 27, p. 71-77, 1993.

ALVES, F. N. A. **Estudo do transporte de manchas de óleo por um modelo lagrangeano de partículas na Bacia de Pelotas**. Dissertação. (Mestrado em Oceanografia Física, Química e Geológica) – Fundação Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, 2006.

AMARAL, K. J do. **Estuário do rio Macaé: modelagem computacional como ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos**. 2003. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Coordenação dos Programas de Pós-Graduação de Engenharia.

ASCE Task Committee on Modeling Oil Spills of the Water Resources Engineering Division. State-of-the-Art Review of Modeling Transport and Fate of Oil Spills. **Journal of Hydraulic Engineering**, Vol. 122, No. 11, Nov., pp. 594 – 609, 1996.

CEKIRGE, H. M.; PALMER, S. L. Mathematical modeling of oil spilled into marine waters. In: **Oil Spill Modelling and Processes**. Londres: WITpress, 2001.

CETESB (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental). Disponível em: <www.cetesb.sp.gov.br>. Acesso em: 30 de novembro de 2008.

CHAO, X.; SHANKAR, N. J.; CHEONG, H. F. Two- and three-dimensional oil spill model for coastal waters. **Ocean Engineering**, v. 28, p. 1557–1573, 2001.

CHAO, X.; SHANKAR, N. J.; WANG, S. S. Y. Development and application of oil spill model for Singapore coastal waters. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 129, p. 495-505, 2003.

CHARLES, W.M.; VAN DEN BERG, E.; LIN, H.X.; HEEMINK, A.W. Adaptive stochastic numerical scheme in parallel random walk models for transport problems in shallow water. **Mathematical and Computer Modelling**, v. 50, p. 1177-1187, 2009.

CHEN, H.; LI, D.; LI, X. Mathematical modeling of oil spill on the sea and application of the modeling in Daya Bay. **Journal of Hydrodynamics, Ser. B**, v. 19, p. 282-291, 2007.

FALCONER, R.A. **Mathematical Modelling of Jet-Forced Circulation in Reservoirs and Harbours**. Tese. Dept. of Civil Engineering of Imperial College, London, 1976.

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

FERNANDES, R. M. **Modelação de Derrames de Hidrocarbonetos**. Dissertação (Graduação em Engenharia do Ambiente) – Instituto Superior Técnico, Lisboa, 2001.

FINGAS, M. Water-in-Oil Emulsion Formation: A Review of Physics and Mathematical Modelling. **Spill Science & Technology Bulletin**, v. 2, p. 55-59, 1995.

FRAGOSO JR., C. R.; FERREIRA, T. F.; MARQUES, D. M. **Modelagem Ecológica em Ecossistemas Aquáticos**. São Paulo: Oficina de textos, 2009.

GAZE, F. N. **Aplicação do Método do Kernel de Densidade na Modelagem Lagrangiana da Trajetória e Evaporação de Mancha de Óleo em Águas Rasas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2009.

GUO, W. J.; WANG, Y. X. A numerical oil spill model based on a hybrid method. **Marine Pollution Bulletin**, v. 58, p. 726-734, 2009.

GUO, W. J.; WANG, Y. X.; XIE, M. X.; CUI, Y. J. Modeling oil spill trajectory in coastal waters based on fractional Brownian motion. **Marine Pollution Bulletin**, v. 58, p. 1339-1346, 2009.

HOULT, D.P. Oil spreading on the sea. **Annual Review of Fluid Mechanics**, p. 341-367, 1972.

IТОPF (International Tanker Owners Pollution Federation). Fate of marine oil spills. **Technical information paper N 2**, 2002.

JANEIRO, J.; FERNANDES, E.; MARTINS, F.; FERNANDES, R. Wind and freshwater influence over hydrocarbon dispersal on Patos Lagoon, Brazil. **Marine Pollution Bulletin**, v. 56, p. 650-665, 2008.

LEHR, W. J. Review of modeling procedures for oil spill weathering behavior. In: **Oil Spill Modelling and Processes**. Londres: WITpress, 2001.

LEHR, W. J.; SIMECK-BEATTY, D. The relation of Langmuir circulation processes to the standard oil spill spreading, dispersion, and transport algorithms. **Spill Science & Technology Bulletin**, v. 6, p. 247-253, 2000.

LEHR, W. J.; CEKIRGE, H. M.; FRAGA, R. J.; BELEN, M.S. Empirical studies of the spreading of oil spills. **Oil and Petrochemical Pollution**, v. 2, p. 7-12, 1984a.

LEHR, W. J.; FRAGA, R. J.; BELEN, M. S.; CEKIRGE, H. M. A new technique to estimate initial spill size using a modified Fay-type spreading formula. **Marine Pollution Bulletin**, v. 15, p. 326-329, 1984b.

LIU, G. R.; LIU, M. B. **Smoothed particle hydrodynamics**: A meshfree particle method. Singapore: World Scientific, 2003.

NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration). **ADIOSM (Automated Data Inquiry for Oil Spill) version 2.0** Seattle: Hazardous materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U. S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut, 2000.

OCEAN STUDIES BOARD AND MARINE BOARD. **Oil in the Sea III**: Inputs, Fates, and Effects. Washington DC: The National Academies Press, 2003.

PALADINO, E. E. **Modelagem Matemática e Simulação Numérica de Trajetórias de Derrames de Petróleo no Mar**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

PEREIRA, M. M. R. **Estudo do Transporte Local de Poluentes em Iperó por Meio de um Modelo Lagrangiano de Partículas**. Tese (Doutorado em Ciências – Área: Meteorologia) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2004.

PIUMBINI, P. P. **Clima de Ondas no Oceano Atlântico adjacente ao Espírito Santo**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2009.

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

REED, M.; TURNER, C.; ODULO, A. The role of wind and emulsification in modelling oil spill and surface drifter trajectories. **Spill Science & Technology Bulletin**, Vol. 1, Issue 2, pp 143-15, 1994.

REED, M.; JOHANSEN, É.; BRANDVIK, P. J.; DALING, P.; LEWIS, A.; FIOCCO, R.; MACKAY, D.; PRENTKI, R. Oil Spill Modeling towards the Close of the 20th Century: Overview of the State of the Art. **Spill Science & Technology Bulletin**, Vol. 5, pp 3-16, 1999.

ROCHA, A. B. **Estudo da Hidrodinâmica e do Transporte de Solutos na Baía do Espírito Santo através de Modelagem Computacional**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2000.

RODEAN, H. C. Notes on the Langevin Model for Turbulent Diffusion of “Marked” Particles. **USA: National Technical Information Service (NTIS)**. 1994.

RODI, W. **Turbulence Models and their Application in Hydraulics. A State-of-the-art review**. Rotterdam. International Association for Hydraulic Research. Monograph, 104p., 1993.

ROSMAN, P. C. C. Um sistema computacional de Hidrodinâmica Ambiental. In: **Métodos Numéricos em Recursos Hídricos**. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Recursos Hídricos, 2001, v.5, p. 1-162.

SANTIAGO, D. I. **Aplicação de um Modelo Lagrangiano de Trajetória de Partículas para Modelagem da Dispersão em Águas Rasas e Simulação no Canal de Acesso ao Porto de Vitória.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, 2007.

SOTO, Y. J. M. **A Modelagem Hidrodinâmica como apoio a Tomada de Decisão em caso de derrame de óleo na parte interna do complexo estuarino Antonina-Paranaguá-Pr.** Dissertação. (Mestrado em Engenharia em Recursos Hídricos e Ambiental) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2004.

SPIVAKOVSKAYA, D.; HEEMINK, A. W.; DELEERSNIJDER, E. Lagrangian modelling of multi-dimensional advection-diffusion with space-varying diffusivities: theory and idealized test cases. **Ocean Dynamics**, v. 57, p. 189–203, 2007a.

SPIVAKOVSKAYA, D.; HEEMINK, A. W.; SCHOENMAKERS, J. G. M. Two-particle models for the estimation of the mean and standard deviation of concentrations in coastal waters. **Stochastic Environmental Research and Risk Assessment**, v. 21, p. 235–251, 2007b.

TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade.** Edusp, São Paulo, 2001.

VASCO, J. R. G.; MACIEL, G. F.; MINUSSI, C. R.; VILA, J. P. Métodos numéricos lagrangeanos: Estudos de caso aplicados a problemas de Engenharia Hidráulica e de Recursos Hídricos. In: **Anais do XVIII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos.** Campo Grande: 2009.

WANG, S.D.; SHEN, Y. M; ZHENG, Y. H. Two-dimensional numerical simulation for transport and fate of oil spills in seas. **Ocean Engineering**, v.32, p. 1556-1571, 2005.

WANG, S.D.; SHEN, Y. M; GUO, Y.; TANG, J. Three-dimensional numerical simulation for transport and fate of oil spills in seas. **Ocean Engineering**, v.35, p. 503-510, 2008.

WOLK, F. **Three-dimensional Lagrangian Tracer Modelling in Wadden Sea Areas.** Diploma Thesis: University Oldenburg, 2003.