

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA

**MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO
NUMÉRICA DE TRAJETÓRIAS DE DERRAMES DE
PETRÓLEO NO MAR**

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM
ENGENHARIA MECÂNICA

EMILIO ERNESTO PALADINO

FLORIANÓPOLIS, ABRIL DE 2000

**MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE TRAJETÓRIAS DE
DERRAMES DE PETRÓLEO NO MAR**

EMILIO PALADINO

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
MESTRE EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL
PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA



Clovis Raimundo Matiska – ORIENTADOR



Julio César Passos – COORDENADOR POSMEC

BANCA EXAMINADORA



Antonio Fabio Carvalho da Silva, Dr. em Eng. Mec.

PRESIDENTE



Davide Franco, Dr. Sc.



Henrique de Melo Lisboa, Dr.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a todas as pessoas que fizeram possível a elaboração deste trabalho, em especial:

Aos meus pais por terem-me incentivado a realizar este curso e pelo financiamento durante o primeiro ano.

Ao professor Maliska pela sábia orientação.

Ao pessoal do SINMEC, tanto pelos momentos compartilhados, quanto pelos conselhos e dicas a nível acadêmico.

Ao CNPq e a FEESC pelo apoio financeiro.

A todas as pessoas que de uma ou outra forma me deram apoio durante a minha estada neste país, especialmente ao Jeferson que me ofereceu amizade, companhia e até contribuiu grandemente no meu aprendizado da língua portuguesa.

Resumo

Este trabalho apresenta um modelo matemático e o seu correspondente tratamento numérico para a estimação da trajetória seguida por manchas de petróleo derramadas no mar. Com este objetivo é desenvolvido um modelo matemático baseado nas equações de Navier-Stokes aplicadas à mancha de óleo, integradas ao longo da espessura da mancha, obtendo-se um modelo 2D-h. Devido à similaridade das equações governantes obtidas com as equações que governam os escoamentos em Águas Rasas, uma metodologia numérica comumente empregada neste tipo de escoamentos é utilizada. Esta metodologia consiste na resolução semi-implícita das equações governantes, isto é, as equações da conservação da quantidade de movimento são resolvidas explicitamente e a equação da massa em forma implícita. Ainda esta metodologia é desenvolvida utilizando-se coordenadas curvilíneas generalizadas, com o intuito de captar facilmente as complexas geografias costeiras para os casos de derrames em regiões litorâneas.

Abstract

This work presents a mathematical model and its numerical treatment for the estimation of oil slicks trajectories spilled at sea. With this aim, it is developed a mathematical model based on Navier-Stokes equations applied to the oil slick, integrated across the thickness of the slick obtaining a 2D-h model. Due to the similarity of the actual government equations with those used in Shallow Waters flows, a methodology commonly employed to simulate these flows, is used here. This methodology consists in the semi-implicit resolution of the government equations, i.e., the momentum equations are solved explicitly and the mass equation implicitly. Still generalized coordinates are used in the numerical model development, with the aim of easy treatment of the complex coastal geographies for spills in coastal regions.

Sumário

RESUMO	IV
ABSTRACT	V
SUMÁRIO	VI
LISTA DE FIGURAS	IX
SIMBOLOGIA	XII
Arábicos	xii
Gregos	xiv
Especiais	xv
Subscritos	xv
Superescritos	xvi
1. INTRODUÇÃO	1
1.1 Motivação	1
1.2 Revisão Bibliográfica	2
1.3 Objetivos e Contribuições	6
2. PROCESSOS FÍSICOS	9
2.1 Processos que acontecem durante um derrame	10

3. MODELOS MATEMÁTICOS	21
3.1 Estado-da-arte	22
3.1.1 Modelos Lagrangeanos	22
3.1.2 Modelos Eulerianos	23
3.1.3 Velocidade total de transporte	27
3.2 Modelo Proposto	28
3.2.1 Integração das equações	28
3.2.2 Análise das equações governantes	35
4. FORMULAÇÃO NUMÉRICA	39
4.1 Transformação das equações governantes	40
4.2 Discretização das equações pelo método dos volumes finitos	43
4.2.1 Equação da convecção-difusão	43
4.2.2 Tratamento do acoplamento $h - \vec{V}$	50
4.2.3 Condições de contorno	58
4.2.4 Procedimento de solução	66
4.3 Evaporação	68
4.3.1 Fundamentação Teórica	68
4.3.2 Incorporação ao Modelo Numérico	71
4.4 Fontes Poluentes	72
5. VÁLIDAÇÃO DO MODELO E RESULTADOS	74
5.1 Problema do espalhamento axisimétrico	75
5.2 Espalhamento e transporte 1D	82
5.3 Espalhamento e transporte 2D	90
5.4 Simulação de um derrame real no porto de São Francisco do Sul	93

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES	104
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	107

Lista de Figuras

Fig. 2.1: Processos que acontecem durante um derramamento.....	11
Fig. 2.2: Relevância dos diferentes fenômenos com o transcorrer do tempo.....	12
Fig. 2.3: As três fases de espalhamento de uma mancha de petróleo em águas calmas	15
Fig. 2.4: Influência da densidade no espalhamento. (1) $\rho = 0.7 \text{ kg/l}$; (2) $\rho = 0.98 \text{ kg/l}$.	16
Fig. 2.5: Taxas de evaporação para diferentes tipos de petróleo. (1) Ekofisc; (2) Forties; (3) Kuwait; (4) Gamba; (5) Tia Juana Pesado.....	17
Fig. 2.6: Taxas de evaporação para duas velocidades do vento, (1) 15 km/h ; (2) 4 km/h	17
Fig. 2.7: Variação da densidade com o tempo de exposição	19
Fig. 2.8: variação da viscosidade com o tempo de exposição	19
Fig. 3.1: Esquema mostrando os parâmetros considerados na integração das equações.	29
Fig. 3.2: Comparação da posição da mancha para diferentes viscosidades, mostrando as isolinhas de espessura de $1 \times 10^{-4} \text{ m}$ e $1 \times 10^{-6} \text{ m}$. Se mostra a posição inicial da mancha e a posição para 30 h de simulação.....	33
Fig. 4.1: Esquema para a integração num volume de controle no plano transformado.	44
Fig. 4.2: Esquema mostrando a distribuição de espessura nos primeiros volumes ocupados pela mancha a montante.	57
Fig. 4.3: Esquema mostrando a fronteira leste no domínio computacional.....	60
Fig. 5.1: Esquema mostrando o modelo $2D_{YZ}$, para o espalhamento axi-simétrico e as variáveis utilizadas no modelo apresentado neste trabalho.....	76

Fig. 5.2:Espalhamento axi-simétrico com espessura inicial de 1 cm.	78
Fig. 5.3: Espalhamento axi-simétrico para um volume inicial de $52 \times 10^4 \text{ m}^3$ e diferentes densidades do óleo, (a) $\rho = 700 \text{ kg/m}^3$, (b) $\rho = 800 \text{ kg/m}^3$, (c) $\rho = 900 \text{ kg/m}^3$	80
Fig. 5.4: Espalhamento axi-simétrico para uma densidade $\rho = 900 \text{ kg/m}^3$ para diferentes volumes derramados. Volume. Inicial: (a) $12 \times 10^5 \text{ m}^3$ e (b) $22 \times 10^4 \text{ m}^3$..	81
Fig. 5.5: Representação esquemática do problema de espalhamento e transporte 1D.	82
Fig. 5.6: Campo de espessuras, para diferentes tempos, para o espalhamento e arraste 1D.	84
Fig. 5.7: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo com um campo de velocidade d'água constante de 0.5 m/s. (a) Posição, (b) Velocidade.....	85
Fig. 5.8: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo com um campo de velocidades d'água constante no espaço e variável senoidalmente no tempo com amplitude de 0.5 m/s e período de 12.5 h. (a) Posição, (b) Velocidade.....	87
Fig. 5.9: Campo de espessuras para o problema de espalhamento e arraste 1D com um campo de velocidades variável senoidalmente no tempo	87
Fig. 5.10: Campo de espessuras da mancha para diferentes valores de $C_f^{\text{Água}}$	88
Fig. 5.11: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo com um campo de velocidade constante d'água de 0.5 m/s e diferentes valores de $C_f^{\text{Água}}$. (a) Posição, (b) Velocidade.....	89
Fig. 5.12: Espessuras para o caso de corrente de água nula e velocidade do vento de 5 m/s.	90
Fig. 5.13: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo para o caso de corrente de água nula e velocidade do vento de 5 m/s. (a) Posição, (b) Velocidade	90

Fig. 5.14: Isolinhas de espessura para $h=1\times 10^{-4}$ e $h=1\times 10^{-6}$ para o problema de espalhamento e arraste 2D. (a) fronteira leste impermeável, (b) fronteira leste com saída de massa.....	91
Fig. 5.15: Massa total na superfície d'água para diferentes condições de contorno.....	93
Fig. 5.16: Definição do domínio e Condições de Contorno para as simulações de um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul	96
Fig. 5.17: Malha utilizada na simulações de um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul	96
Fig. 5.18: Campos de espessura ($\times 10^{-4}$ m) para um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul. (caso 1).	98
Fig. 5.19: Campos de espessura ($\times 10^{-4}$ m) para um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul. (caso 2).	100
Fig. 5.20: Campos de espessura ($\times 10^{-4}$ m) para um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul. (caso 3).	102

SIMBOLOGIA

Arábicos

A	Área da mancha de óleo
c	Concentração de Poluente
C_f	Coefficiente de Atrito
C	Coefficiente “tipo” difusivo
D	Difusividade na face do volume de controle
F_v	Fração volumétrica evaporada
g	Aceleração da gravidade terrestre
$g_{11}, g_{12}, g_{21}, g_{22}$	Componentes do tensor métrico contravariante 2D
h	Espessura da mancha de óleo
J	Jacobiano da transformação de coordenadas
K	Coefficiente de transferência de massa óleo–ar
L	Comprimento característico da mancha de óleo
\dot{m}	Vazão mássica de óleo entrando no mar
\dot{M}	Vazão mássica na face do volume de controle
M	Massa presente dentro do volume de controle
N	Taxa de evaporação
p	Pressão

P_v	Pressão de vapor
R, r	Raio da mancha de óleo
S	Termo Fonte
\hat{S}	Termo Fonte Transformado
t	Tempo
T	Temperatura
u	Componente da velocidade na direção x
v	Componente da velocidade na direção y
w	Componente da velocidade na direção z
U	Componente da velocidade na direção x , para os campos externos (Ventos e Correntes Marinhas)
V	Componente da velocidade na direção y , para os campos externos (Ventos e Correntes Marinhas)
\tilde{U}	Componente contravariante da velocidade sem normalização métrica
\tilde{V}	Componente contravariante da velocidade sem normalização métrica
\vec{W}	Velocidade do Vento
$x_\xi, y_\xi, x_\eta, y_\eta$	Métricas da transformação inversa
X_{CM}, Y_{CM}	Coordenadas do centro de massa da mancha de óleo
\vec{S}	Deslocamento das parcelas de óleo em Modelos Lagrangeanos
\vec{V}	Vetor Velocidade
\mathbf{u}	Vetor Velocidade quando é utilizada Notação Indicial

\mathbf{V}	Vetor Velocidade quando é utilizada Notação Indicial, para os campos externos (Ventos e Correntes Marinhas)
\bar{n}	Vetor normal a uma superfície
$\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$	Versores Canônicos

Gregos

α, β, γ	Componentes do tensor métrico contravariante 2D
δ	Altura da superfície superior da mancha de óleo
δ_h	Espessura da camada limite d'água por baixo da mancha de óleo
δt	Subdivisão do intervalo temporal (Modelos Lagrangeanos)
Δ	Incremento da variável à qual se antepõe
Δ	Relação de densidades do óleo e a água
ϕ	Variável Genérica
Γ	Difusividade genérica
μ	Viscosidade Dinâmica (quando não tiver subscrito deve ser tomada como viscosidade do óleo)
ρ	Densidade (quando não tiver subscrito deve ser tomada como densidade do óleo)
τ	Tensão cisalhante no topo ou fundo da mancha de óleo
ξ, η	Coordenadas no plano transformado
$\xi_x, \eta_x, \xi_y, \eta_y$	Métricas da transformação de coordenadas
ζ	Altura da superfície inferior da mancha de óleo

Especiais

$\frac{\partial}{\partial t}$	Derivada parcial com respeito ao tempo
$\frac{\partial}{\partial x}$	Derivada parcial com respeito a x
$\frac{\partial}{\partial y}$	Derivada parcial com respeito a y
$\frac{\partial}{\partial \xi}$	Derivada parcial com respeito a ξ
$\frac{\partial}{\partial \eta}$	Derivada parcial com respeito a η
$\frac{\partial}{\partial x_i}$	Derivada parcial com respeito à i -ésima direção coordenada
∇	Operador Divergente
∇^2	Operador Laplaciano
$F[]$	Operador Convectivo Difusivo Explícito em Volumes Finitos

Subscritos

W	Relativo ao Vento
i	Relativo à i -ésima direção coordenada
f	Relativo à fronteira do domínio de cálculo
n, s, e, w	Faces do volume de controle (norte, sul, leste, oeste)
$N, S, E, W,$ NE, NW, SE, SW	Volumes Vizinhos ao Volume de Controle
NB	Volumes Vizinhos, em forma genérica, ao volume de controle

P	Volume de controle analisado
0	Variável avaliada no intervalo temporal anterior

Superescritos

<i>Água, água</i>	Relativo à água
<i>Óleo, óleo</i>	Relativo ao óleo
<i>Vento, vento</i>	Relativo ao vento
T	Topo da Mancha de óleo
B	Fundo da Mancha de óleo
ϕ	Relativo a ϕ

Nota: Todas as magnitudes foram avaliadas no Sistema Internacional de Medidas.

1. Introdução

1.1 Motivação

O meio ambiente é hoje uma das principais preocupações do setor industrial e porque não, da sociedade em geral. No caso particular da indústria petroleira, pelo fato de ser esta de alto risco para o meio ambiente, esta preocupação é ainda maior. Uma das maiores catástrofes ambientais que podem acontecer são os grandes derrames de petróleo, fundamentalmente quando estes acontecem em regiões costeiras. Como famosos exemplos lamentáveis podemos citar os derrames do Argo Merchant (17.000 m³) e Amoco Cadiz (622.000 m³) acontecidos no Mar do Norte, Exxon Valdez em Alasca (40.000 m³) ou o derrame acontecido recentemente na Baía de Guanabara (1.000 m³) que nos toca bem de perto. Mesmo sendo este último de menor magnitude em comparação com os anteriores mencionados, o fato de ter acontecido dentro de uma baía faz com que os efeitos sejam muito nocivos para o ecossistema local.

Assim, os derrames de petróleo em áreas marítimas e fluviais tem recebido grande atenção por parte de varias áreas de pesquisa. Os impactos que este tipo de acidente podem causar são dos mais diversos e abrangem desde danos econômicos, por problemas causados na indústria pesqueira, ou qualquer indústria que utilize recursos marinhos como matéria prima, até a inutilização de regiões turísticas.

As áreas da física, química e da mecânica dos fluidos e, no caso particular, a simulação numérica, procuram contribuir através da quantificação dos processos fluidodinâmicos e físico-químicos que acontecem quando o petróleo atinge os corpos d'água. Um dos principais objetivos, então, é a avaliação da trajetória seguida pelos derrames de petróleo, o que é de extrema importância em tarefas de combate a poluição e recuperação do petróleo derramado. O conhecimento da trajetória é também fundamental para a estimação de riscos potenciais, isto é, a determinação das áreas que poderiam ser atingidas no caso de acontecer um derrame. Portanto, o

conhecimento da trajetória seguida por um eventual derrame é de fundamental importância na hora de planejar rotas para navios tanques, pontos de carga e descarga de óleo, rotas de oleodutos, etc.. Ainda, um modelo para estimar trajetórias de derrames deveria fazer parte de qualquer plano de contingência de combate à poluição.

Destes fatos, surge a motivação para o desenvolvimento deste trabalho que consiste em estudar e modelar os fenômenos fluidodinâmicos que tem lugar quando o petróleo é derramado no mar. No caso do Brasil, sabemos que grande parte da exploração petroleira é *off-shore* aumentando assim o risco do acontecimento de derrames no mar durante operações de exploração e transporte de petróleo.

1.2 Revisão Bibliográfica

O propósito desta seção é apresentar brevemente os modelos mais comumente utilizados na modelagem de derrames de petróleo. Outros modelos, além dos mencionados aqui, são utilizados, porém a maioria deles são baseados nos apresentados a seguir ou combinações dos mesmos.

Os primeiros trabalhos desenvolvidos, no que diz respeito aos modelos de transporte de derrames de petróleo, eram extremamente teóricos e não consideravam alguns fenômenos fundamentais para a correta quantificação dos processos reais que acontecem num derrame, como a dispersão causada pelos ventos e as correntes marinhas, evaporação, emulsificação, etc..

Serão descritos, sucintamente, os modelos de trajetória de derrames de petróleo encontrados pelo autor na literatura. Alguns deles, os que sejam considerados representativos do estado-da-arte na modelagem de derrames de petróleo, serão descritos com maiores detalhes no Cap. 3.

Fay (1969), que foi um dos precursores no estudo da fluidodinâmica de derrames de petróleo, caracterizou o comportamento de uma mancha de petróleo a partir das forças que atuam no espalhamento da mesma dividindo o fenômeno em três regimes, gravitacional–inercial, gravitacional–viscoso e viscoso–tensão superficial. Estes regimes serão descritos em detalhe logo mais. Logo, derivou a partir da análise

de ordens de grandeza, correlações para derrames de volume constante com formas idealizadas.

Estas correlações permitem avaliar, em função do tempo transcorrido a partir de produzido o derrame, o tamanho de manchas unidimensionais ou circulares (modelo axi-simétrico), se espalhando em águas totalmente calmas. Estas correlações foram deduzidas separadamente para cada um dos regimes de espalhamento mencionados, fazendo-se um balanço entre as forças predominantes em cada fase.

Posteriormente, Fay (1971), revisou as fórmulas de espalhamento e acrescentou coeficientes obtidos empiricamente que melhoraram a capacidade preditiva das correlações obtidas no seu trabalho inicial.

Fannelop e Waldman (1971) fizeram um estudo teórico do espalhamento sob os regimes inercial e viscoso, integrando na espessura da mancha, as equações da conservação da massa e quantidade de movimento na forma bi-dimensional ($2D_{YZ}$) e utilizando uma correlação aproximada para avaliar a tensão de cisalhamento da camada limite de água sobre o óleo. O regime de espalhamento em tensão superficial é equacionado aproximadamente, fazendo-se um balanço de forças na borda da mancha e utilizando a mesma correlação para a tensão de cisalhante na interface. Os resultados são utilizados para avaliar em forma teórica os coeficientes para as correlações de Fay obtendo boas aproximações com aqueles obtidos em Fay (1971) exceto para o regime de espalhamento em tensão superficial, onde o erro é um pouco maior.

Hoult (1972) levou em conta as correntes advectivas propondo que o espalhamento do óleo pode ser visto como composto de duas partes: a advecção devida às correntes e os ventos e a tendência natural do óleo a se espalhar em águas calmas. No mesmo trabalho, Hoult rededuziu as fórmulas de Fay e as corroborou através de soluções de similaridade das equações do movimento aplicadas a mancha de óleo. Ainda nesse trabalho são apresentadas corroborações empíricas destas fórmulas de espalhamento.

Buckamster (1973) apresentou um modelo similar ao anterior mas apenas considerando o espalhamento gravitacional-viscoso. Apresenta uma solução analítica por séries e uma solução numérica. Esta solução, similarmente à de Hoult (1972)

acima e diferentemente da apresentada por Fay (1971), não deixa parâmetros livres a serem ajustados empiricamente.

DiPietro *et alii* (1978) fizeram um estudo teórico bi-dimensional do espalhamento unidirecional¹ da expansão de uma mancha de óleo sob os três regimes de espalhamento. O modelo se baseia na resolução das equações do movimento aplicadas à mancha de óleo, acopladas com as equações da camada limite da água através de um método de perturbação e solução por similaridade, utilizando como parâmetro de perturbação a relação entre a espessura da mancha e sua largura. O fato de considerar este parâmetro pequeno, traz a hipótese que os vetores normais às superfícies da mancha são verticais. Esta hipótese é considerada na maioria dos modelos e inclusive será utilizada neste trabalho.

Hess e Kerr (1979) apresentaram um modelo para o espalhamento devido a gravidade e transporte causado pelas correntes e ventos de uma mancha de óleo derramada no mar. Este modelo é provavelmente o que possui maior similaridade com o que será apresentado neste trabalho, pelo fato de utilizar as equações de conservação da massa e quantidade de movimento aplicadas à mancha de óleo integradas na direção vertical. Este modelo considera o espalhamento sob os três regimes, já que leva em conta todas as forças atuantes sobre a mancha, gravidade, tensão superficial, inércia e viscosidade. Ainda, nesse trabalho, são apresentados modelos simplificados para o movimento da água e os ventos. O modelo para a água considera as correntes induzidas por ventos na camada superficial do mar e o modelo para os ventos é baseado na análise de dados obtidos através de um modelo atmosférico “multi-nível”.

Foda e Cox (1980) estudaram o espalhamento unidirecional de uma mancha de óleo considerando apenas o regime de espalhamento em tensão superficial através de uma solução de similaridade, resolvendo numericamente as equações ordinárias resultantes. Também é apresentada a corroboração empírica dos resultados obtidos.

¹ Chamamos de modelos “uni-direcionais” aqueles que são bi-dimensionais no plano vertical ($2 D_{VZ}$) mas consideram uma única direção de espalhamento.

Benqué *et alii* (1982) apresentam um modelo bi-dimensional para regime gravitatório-viscoso. É similar ao apresentado por Hess e Kerr (1979), porém não considera as forças inerciais e de tensão superficial. Pelo fato dos termos convectivos não serem considerados, as equações do movimento resultam simplificadas, já que estas resultam de um balanço entre as tensões devidas às correntes e os ventos e as forças gravitacionais. Logo, as velocidades são isoladas das equações do movimento e substituídas na equação da conservação da massa, resultando em uma única equação para o cálculo da espessura da mancha de petróleo. Nas seções seguintes discutiremos com maior detalhe este modelo pelo fato de ser similar ao modelo utilizado neste trabalho.

Shen e Yapa (1988) utilizaram as correlações de Fay (1971) em superposição com um algoritmo de Parcelas Discretas Lagrangeanas (*Lagrangian Discrete-Parcel Algorithm*) para avaliar a advecção e o espalhamento. Este modelo também considera derrames contínuos ou instantâneos, levando em conta a difusão turbulenta horizontal através de um procedimento de caminho aleatório, evaporação, diluição e deposição na costa. O modelo tem demonstrado ser preciso no cálculo da trajetória e de baixo custo computacional.

Venkatesh (1988) apresentou o modelo do Serviço Canadense de Atmosfera e Meio Ambiente (*AES Oil Spill Model*), baseado em uma equação de convecção-difusão de espécies. Como será visto no Cap. 3, neste tipo de modelos, os termos convectivos representam o transporte do óleo pelos ventos e as correntes marinhas, enquanto os termos difusivos representam o espalhamento do óleo. Neste modelo a velocidade convectiva é obtida a partir da composição de uma parcela da velocidade do vento e as correntes marinhas, que por sua vez são obtidas a partir da corrente superficial induzida pelo vento, as correntes de maré e as correntes residuais. A avaliação desta velocidade de transporte é explicada em detalhe no Cap. 3. Este modelo ainda considera o espalhamento devido a gravidade e tensão superficial e o espalhamento turbulento (dispersão turbulenta).

Cuesta *et alii.*(1990), utilizaram o modelo de Benqué *et alii*(1982) melhorando-se as condições de contorno para quantificar a dispersão e acumulação do óleo sobre a linha de costa e permitir a saída de massa do domínio de cálculo. Na avaliação das velocidades de transporte são consideradas as correntes de maré, correntes residuais

e os ventos no local. Ainda, o modelo leva em consideração a evaporação, através de um modelo de decaimento logarítmico apresentado por Stiver e Mackay (1984) e foi implementado em coordenadas generalizadas, para facilitar o tratamento das geometrias. O modelo foi testado e comparado com valores observados do derrame do petroleiro Amoco Cadiz, mostrando bons resultados.

Borthwick e Joynes (1992) apresentaram um modelo para pequena escala de advecção-difusão do óleo para derrames em regiões costeiras. O modelo não leva em conta o espalhamento mecânico (dado pela força de gravidade e tensão superficial) e sim o espalhamento turbulento dado pela forte turbulência induzida pela arrebentação das ondas. O espalhamento turbulento é o fenômeno dominante na trajetória quando os derrames ocorrem na região de arrebentação. O modelo é baseado numa equação de espécies, advectiva pura, onde a parte difusiva aparece quando a advecção turbulenta é considerada através de termos difusivos. No mesmo trabalho é apresentado um estudo experimental indicando resultados razoavelmente bons do modelo numérico.

Meyer *et alii* (1998) utilizaram uma equação de conservação de espécies, onde é considerado apenas o espalhamento gravitacional-viscoso. As transformações físico-químicas do óleo (evaporação, diluição, emulsificação, etc.) são consideradas através de decaimento que aparece na equação de conservação como um termo fonte proporcional à concentração de óleo.

1.3 Objetivos e Contribuições

Neste trabalho, será desenvolvido um modelo para estimar a trajetória de derrames de petróleo no mar. Com esse objetivo, serão estudados primeiramente os fenômenos físicos que acontecem quando uma mancha de óleo atinge a superfície do mar. Neste contexto, serão estudados a maioria dos fenômenos físicos que até hoje se conhecem na literatura.

Será logo apresentado o estado-da-arte de modelos de trajetória e proposto um modelo baseado nas equações de conservação da massa e quantidade de movimento aplicadas à mancha de óleo. Este modelo se baseia na integração ao longo da espessura da mancha das equações governantes obtendo-se assim um modelo 2D-h

para a estimação da trajetória da mancha. Desta forma, o modelo desenvolvido é consistente com a fenomenologia física do problema. Nenhum termo é desprezado nas equações, já que inicialmente o objetivo é estudar a fluidodinâmica do fenômeno e a influência dos diferentes termos no problema analisado.

O modelo numérico para a resolução das equações é desenvolvido utilizando-se coordenadas curvilíneas generalizadas facilitando assim o tratamento das geometrias resultantes das complexas geografias costeiras. Finalmente, são apresentadas comparações de alguns resultados obtidos com este modelo com soluções disponíveis na literatura, e também são apresentadas simulações para eventuais derrames no porto de São Francisco do Sul para mostrar a aplicação do modelo em casos reais.

Assim, os objetivos principais do presente trabalho podem ser resumidos como:

- Estudar os processos hidrodinâmicos que afetam as manchas de petróleo originadas por derrames no mar. Com este objetivo, será proposto um modelo matemático que represente estes fenômenos o mais realisticamente possível, porém sem deixar de lado a simplicidade, visando à possibilidade deste modelo ser usado como ferramenta de engenharia. Também, será proposto o correspondente tratamento numérico para este modelo matemático.
- Dar início através deste estudo a uma linha de pesquisa que tem como objetivo final a criação de uma ferramenta computacional ampla para a simulação numérica de trajetórias de derrames de petróleo.

O modelo a ser desenvolvido aqui deverá ter como dados de entrada o campo de velocidades da água e os ventos como função do espaço e do tempo no local do derrame. A maioria dos modelos utilizados em simuladores são desenvolvidos sob este conceito. Existem inclusive programas integrais de combate à poluição por derrames de petróleo como EUROSPIILL (Elliot, 1991) onde bases de dados com históricos de medições em campo de correntes residuais, marés, etc. e campos de ventos são acopladas a modelos de trajetória de derrames. Outros simuladores utilizam modelos hidrodinâmicos (*e.g.* águas rasas) para avaliar os campos de velocidade da água.

Para a manipulação destes dados, se criará um modelo de interpolação de maneira a estabelecer um campo contínuo² das variáveis a partir de valores discretos obtidos em medições de campo. Isto é importante no caso dos campos de ventos na zona do derrame já que a modelagem deste tipo de escoamentos é de relativa complexidade.

² Do ponto de vista numérico chamamos “contínuo” quando se dispõe de um valor da variável em cada volume de controle.

2. Processos Físicos

Entre outras, as especialidades que mais entendimento tem com o estudo de derrames de petróleo são: química, estudando os processos físico-químicos do fenômeno, como diluição, evaporação, etc.; engenharia ambiental, preocupando-se com o impacto que um acidente deste tipo possa causar no meio ambiente, e a área da mecânica dos fluidos tentando modelar as trajetórias dos derramamentos através dos modelos de transporte e das equações do movimento.

A trajetória da mancha contaminante é governada fundamentalmente pelas equações do movimento, enquanto que sua concentração depende também, e de forma importante, de processos físico-químicos como evaporação, diluição, dispersão, degradação biológica, etc.. Neste aspecto, sabemos que o óleo é composto por uma grande quantidade de componentes com diferentes propriedades físico-químicas e este é um dos fatores que mais dificultam a modelagem de derramamentos de petróleo, pois algumas fases se dissolvem na água, outras no ar, e ainda com diferentes pontos de ebulição e diferentes solubilidades, além de outros fenômenos. Na literatura, os processos que governam a trajetória da mancha são denominados Processos de Transporte enquanto que os processos físico-químicos que modificam as propriedades do óleo e provocam transferência de massa do óleo sobre a superfície para a atmosfera e o mar são chamados Processo de Destino, isto é, processos que governam o destino final do óleo derramado.

Os primeiros modelos desenvolvidos na área (Fay, 1969, Hoult, 1972, Fannelop e Waldman, 1971 e DiPietro *et alii*, 1978, entre outros) se ocupavam basicamente com a trajetória dos derrames com modelos extremamente teóricos que se baseavam no equacionamento bi-dimensional no plano vertical ($2D_{yz}$). A maioria deles não levava em conta o transporte causado pelas correntes marinhas e os ventos, e não considerava nenhum tipo de processo de destino como evaporação, dispersão, etc..

Segundo a Sociedade Americana de Engenheiros Civis, ASCE (*Task Committee on Modeling Oil Spills*, 1996) os modelos tem evoluído, nos últimos 25 anos, desde aqueles modelos bi-dimensionais (2D_{YZ}) que consideram apenas a trajetória, até modelos tridimensionais que incluem processos como evaporação, emulsificação, diluição, etc. e a dispersão devida ao arraste das correntes e os ventos.

Uma vez que a maioria dos modelos de transporte atuais são baseados no balanço de massa global, para avaliar a trajetória da mancha de óleo, alguns fenômenos que influem fortemente neste balanço, como a evaporação, devem ser levados em conta, ainda quando o objetivo seja apenas o cálculo da trajetória. Segundo a referência anterior a evaporação pode atingir até 75 % da massa total derramada, em óleos de baixa densidade, e evidentemente, este processo terá uma forte influência no balanço de massa global.

Dos processos que governam a trajetória da mancha de óleo, os mais importantes são a advecção do óleo causada pelos ventos, as correntes marinhas (*drifting*) e o espalhamento da mancha devido ao escoamento sobre si mesmo, como se a mancha se espalhasse em águas totalmente calmas, causado por forças de gravidade e tensão superficial (*spreading*). Estes e outros processos que ocorrem durante o derrame são descritos na seção a seguir. Deve-se deixar claro que nem todos os fenômenos descritos a seguir serão considerados na modelagem neste trabalho, mas é importante a descrição detalhada destes fenômenos, tanto para um bom entendimento do problema como para futuras modelagens.

2.1 Processos que acontecem durante um derrame

São muitos os processos que tem lugar quando acontece um derrame de petróleo. Como já foi destacado, estes podem ser divididos em duas grandes categorias; os processos de transporte e os processos físico-químicos, que dão lugar à transferência de massa entre os diferentes meios (óleo-atmosfera e óleo-mar), que são chamados de Processo de Destino.

Na figura abaixo (Fig. 2.1), extraída do trabalho de Shen e Yapa (1988), se destacam os principais processos que afetam a mancha de óleo após o derrame,

mostrando também, numa escala temporal, a relevância dos fenômenos em função do tempo transcorrido após os derrame.

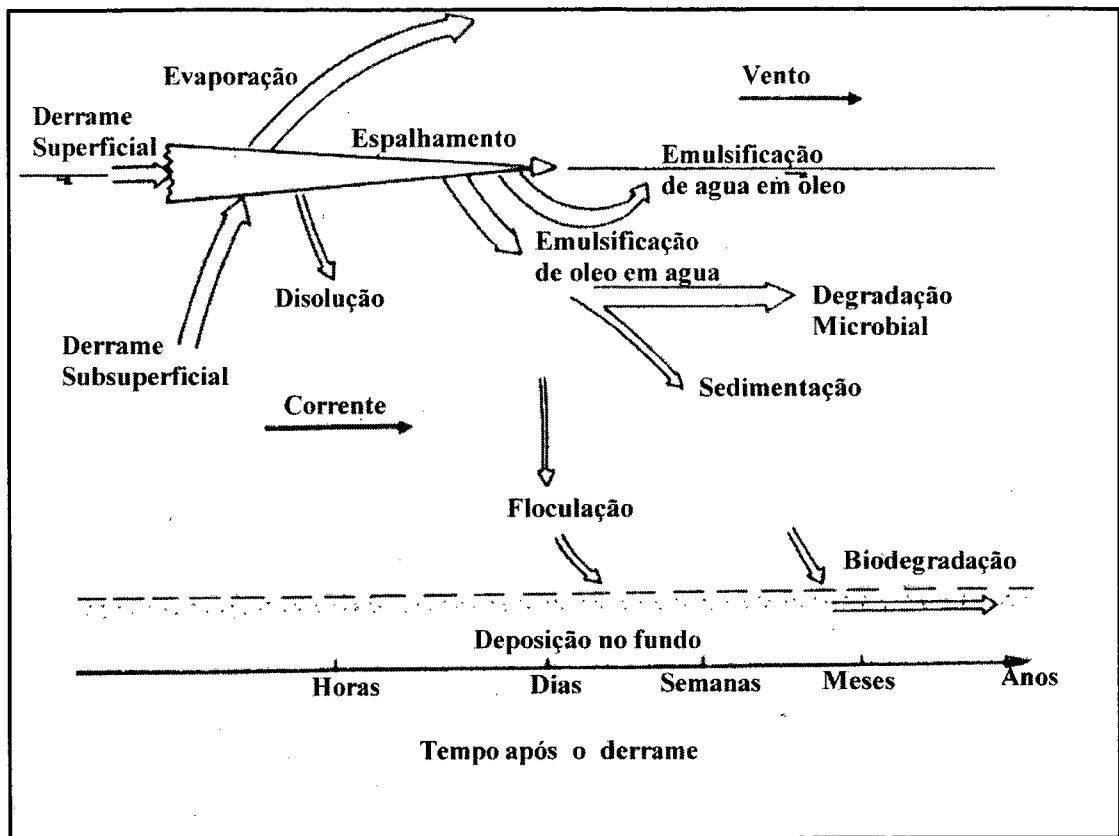


Fig. 2.1: Processos que acontecem durante um derramamento

Na revisão da ASCE (1996) e no livro de Doerffer (1992), é dada uma breve descrição de cada um dos fenômenos que se observam na Fig. 2.1. A seguir, descreveremos, também em forma sucinta estes processos, deixando claro que apenas alguns deles, os que tenham maior relevância no cálculo da trajetória, serão levados em consideração na modelagem a ser feita neste trabalho. A Fig. 2.2 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. A linha vertical pontilhada indica aproximadamente até que etapa será considerada na modelagem no presente trabalho, isto é, em termos temporais, já que, como foi mencionado, nem todos os fenômenos mostrados serão considerados.

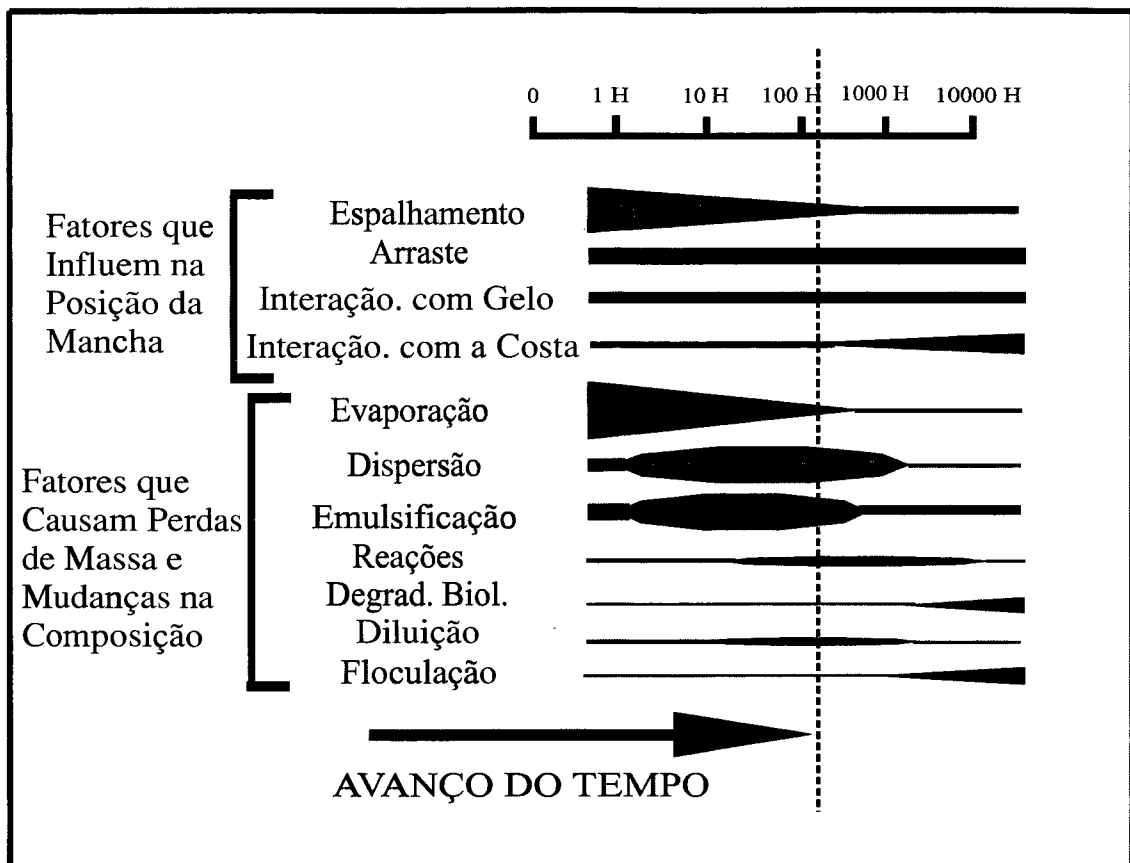


Fig. 2.2: Relevância dos diferentes fenômenos com o transcorrer do tempo

Os fenômenos mais importantes a ser considerados na modelagem de derrames de petróleo são:

Advecção: É o processo de transporte da mancha de óleo dado pelo arraste das correntes marinhas, e dos ventos. Também são transportadas pelas correntes sub-superficiais as pequenas bolas de óleo que se desprendem da mancha por dispersão e ficam suspensas durante algum tempo na sub-superfície da água.

Para a correta quantificação deste fenômeno é importante conhecer com precisão os campos de ventos e correntes na superfície d'água e, para isto, modelos atmosféricos e oceânicos são acoplados aos modelos de trajetória de derrames. Contudo, os modelos oceânicos, geralmente consideram apenas as correntes residuais e induzidas pelas marés. As correntes induzidas pelas ondas e os ventos locais são normalmente consideradas proporcionais a velocidade do vento através de um fator semi-empírico e um ângulo de deflexão que leva em conta a rotação da terra. Logo, são somadas vetorialmente todas as componentes para se obter o campo de

velocidades na superfície d'água que é um dado de entrada nos modelos de trajetória de derrames.

Inicialmente, este fenômeno foi levado em consideração supondo que o centro de massa da mancha se desloca com a velocidade superficial, calculada segundo o procedimento descrito no parágrafo anterior, e calculando separadamente o espalhamento. Modelos mais recentes consideram a advecção, difusão turbulenta e espalhamento em conjunto, já que os gradientes de velocidade na superfície d'água e a turbulência afetam o processo de espalhamento, e não apenas deslocam o centro de massa da mancha.

Difusão Turbulenta: A turbulência superficial da água e dos ventos fazem com que a mancha se espalhe mais rapidamente. As tensões induzidas horizontais aumentam o espalhamento horizontal da mancha, enquanto que as tensões induzidas verticais causam a dispersão vertical da mancha através do desprendimento de pequenas bolhas (fenômeno de dispersão) que logo serão afetadas por outros processos de degradação como diluição, emulsificação, etc.. Em alguns modelos, a dispersão turbulenta horizontal é considerada juntamente com o espalhamento devido à gravidade e tensão superficial já que, na realidade, ambos fenômenos tem o mesmo efeito. Por isto é comum encontrar na literatura os termos espalhamento físico, referendo-se aquele causado por forças de gravidade e tensão superficial e espalhamento turbulento referendo-se à dispersão turbulenta horizontal. A turbulência é introduzida como termos difusivos nas equações de conservação.

Espalhamento: É a expansão horizontal da mancha de óleo devida à tendência do óleo a escoar sobre si mesmo, causada por forças de gravidade e tensão superficial. Este processo é um dos que mais afetam o comportamento da mancha, especialmente logo após ter sido produzido o derramamento.

A teoria mais fortemente aceita é aquela apresentada por Fay (1969) que divide o fenômeno em três etapas, dependendo das forças que dominam o espalhamento.

Nos primeiros instantes após o derramamento a espessura da mancha é importante e portanto as forças de inércia são dominantes como forças resistivas, enquanto a gravidade atua como força ativa. Logo, nesta etapa o balanço é entre forças de inércia e gravitacionais (Espalhamento Gravitacional - Inercial).

Após as primeiras horas e até alguns dias, dependendo da magnitude do derrame, a espessura da mancha diminui e as forças viscosas começam influir mais do que as de inércia, mantendo-se a gravidade como força ativa, estabelecendo-se, então, um balanço entre forças de viscosidade e gravidade (Espalhamento Gravitacional - Viscoso).

Nestas duas etapas, a mancha se mantém relativamente coesa mantendo, em média, uma espessura da ordem de 1 a 10 milímetros, dependendo do volume derramado.

Na última etapa do processo, a espessura é extremamente pequena, perdendo-se totalmente a coesão, e as forças de gravidade deixam de ser importantes, dando lugar às forças de tensão superficial como forças ativas e mantendo-se as forças viscosas como passivas. Este regime é chamado de espalhamento em tensão superficial.

Deve-se deixar claro que todas as quatro forças, de gravidade, tensão superficial, inércia e viscosidade, estão presentes nas três etapas, mas estes processos foram caracterizados pelas forças que tem maior ponderação na diferentes etapas, e portanto, governam o fenômeno durante cada etapa.

Da descrição do processo de espalhamento, podemos concluir que este fenômeno depende fundamentalmente das propriedades físicas do óleo derramado, *i.e.*, densidade, viscosidade, e tensão superficial. A tensão superficial é uma propriedade interfacial, ou seja, que está relacionada a duas faces ou substâncias e, portanto não faz sentido falar da tensão superficial do óleo por si só. Para quantificar as forças de tensão superficial atuando na mancha, geralmente se define o comumente chamado na literatura de coeficiente de espalhamento, definido como

$$S \equiv \sigma_{23} - \sigma_{13} - \sigma_{12} \quad (2.1)$$

onde σ_{23} , σ_{13} e σ_{12} são respectivamente as tensões entre água-ar, óleo-ar e óleo-água. O parâmetro S representa o balanço de forças por unidade de comprimento na borda da mancha.

Na Fig. 2.3(extraída de Doerffer (1992)), é mostrada uma curva de espalhamento típica onde podem-se observar as três fases do espalhamento. A seguir se mostra a influência da densidade do óleo na velocidade de espalhamento da mancha. Note que os tempos para cada etapa são diferentes na Fig. 2.4, isto significa que o volume derramado nesse caso é menor. A influência da tensão superficial não será considerada neste trabalho pois traria aparelhada muita complexidade na modelagem sem melhorar os resultados, para as duas primeiras etapas do espalhamento que serão consideradas neste trabalho. Assim, este fenômeno será apresentado apenas em forma descritiva.

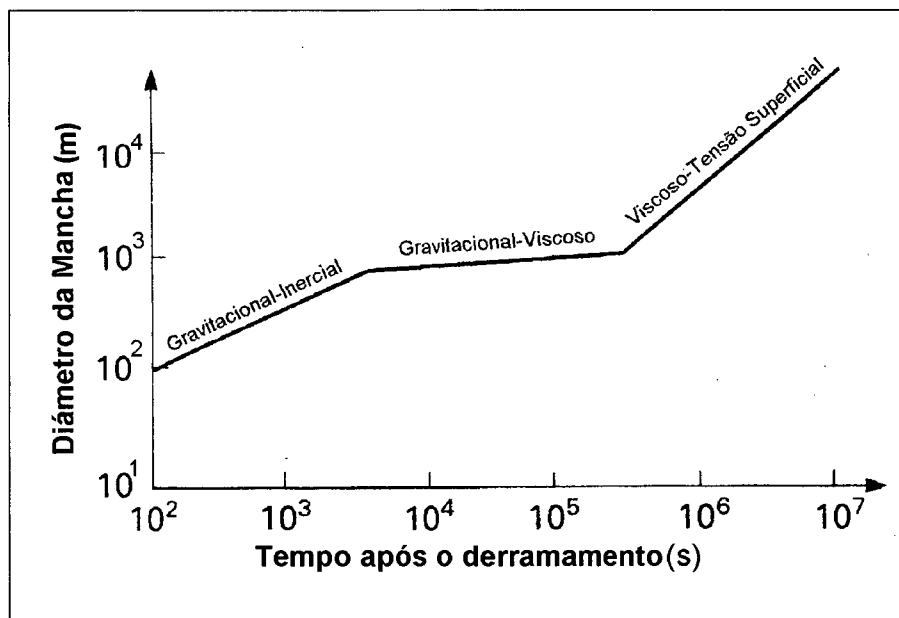


Fig. 2.3: As três fases de espalhamento de uma mancha de petróleo em águas calmas

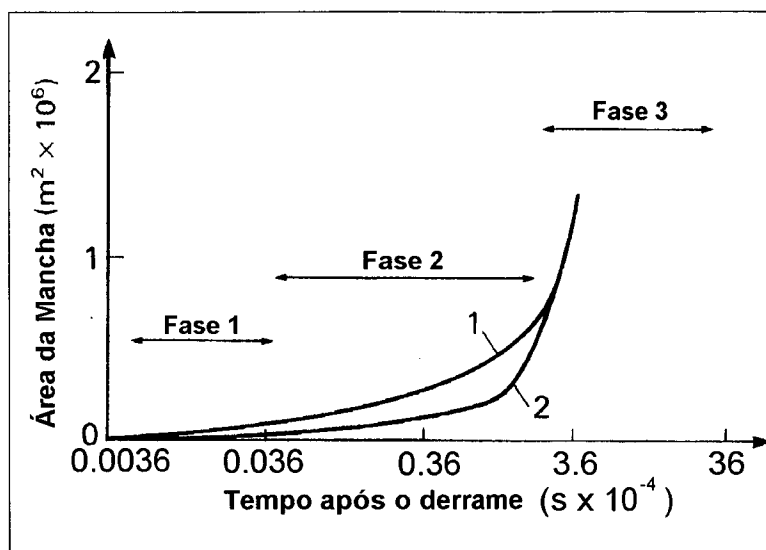


Fig. 2.4: Influência da densidade no espalhamento. (1) $\rho = 0.7 \text{ kg/l}$; (2) $\rho = 0.98 \text{ kg/l}$

Evaporação: O fenômeno de evaporação é extremamente complexo devido, fundamentalmente, ao fato do petróleo ser um fluido formado por uma grande quantidade de componentes. Estes componentes tem diferentes temperaturas de evaporação assim como diferentes graus de solubilidade e saturação no ar, o que torna muito difícil um tratamento detalhado deste fenômeno. Diferentemente de uma substância pura, onde a taxa de evaporação é constante, um sistema multicomponente como o petróleo possui uma taxa de evaporação logarítmica devido aos diferentes pontos de ebulição de seus componentes. Segundo Doerffer (1992) as componentes mais leves que abrangem até aproximadamente os *n*-octanos (*n*-C₈) se evaporam completamente, enquanto as frações mais pesadas do que *n*-octodecanos (*n*-C₁₈) não se evaporaram em forma apreciável em condições ambientais normais.

Vários autores (Stiver e Mackay, 1984,1989; Doerffer, 1992; ASCE, 1996; entre outros) concordam que a taxa de evaporação em uma mancha depende fundamentalmente dos seguintes fatores: velocidade do vento local, propriedades físicas do óleo, superfície da mancha, pressão de vapor, espessura da mancha, e temperatura e condições de radiação no local.

Segundo a ASCE (1996) o modelo mais utilizado é aquele apresentado por Stiver e Mackay (1984), o qual será utilizado neste trabalho.

Nas Fig. 2.5 e Fig. 2.6, se observa a dependência logarítmica da taxa de evaporação com o tempo de exposição e a influência da velocidade do vento e do tipo de óleo na taxa de evaporação. Observamos que quanto maior a densidade do óleo menor a taxa de evaporação, já que os óleos mais pesados contém maior quantidade de componentes com altos pontos de ebulição. A velocidade do vento influi diretamente no coeficiente de transferência de massa e portanto, a taxa de evaporação aumenta com a velocidade do vento.

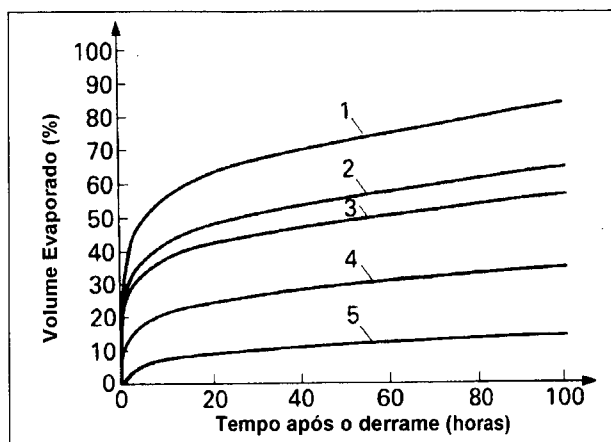


Fig. 2.5: Taxas de evaporação para diferentes tipos de petróleo. (1) Ekofisc; (2) Forties; (3) Kuwait; (4) Gamba; (5) Tia Juana Pesado

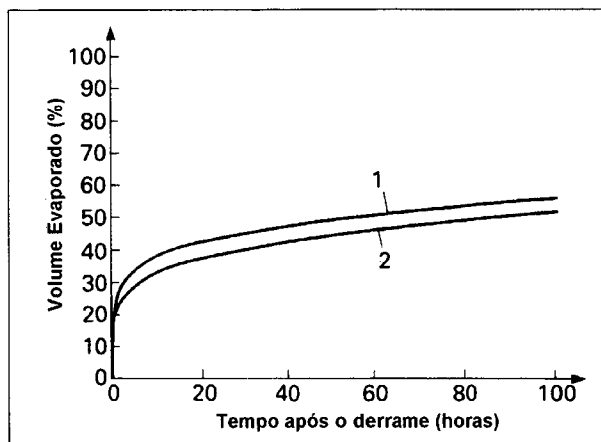


Fig. 2.6: Taxas de evaporação para duas velocidades do vento, (1) 15 km/h; (2) 4 km/h

Diluição: É o processo de diluição dos componentes do petróleo solúveis em água (difusão molecular). Este é um dos processos que menos afetam a trajetória, já que apenas 1 % da massa total do óleo se dissolve em água (ASCE (1996)). Segundo Doerffer (1992), em um balanço de massa global, as relações entre a massa perdida por evaporação e diluição podem chegar até cem para um. Contudo este processo é muito importante do ponto de vista biológico já que as componentes mais solúveis em água são por sua vez as mais tóxicas.

Dispersão: Como já foi dito, as tensões turbulentas tendem a desprender bolhas da mancha de óleo. Estas bolhas são logo afetadas pelos outros processos de degradação (emulsificação, diluição, biodegradação, etc.). Devido à maior relação superfície-volume destas bolhas com respeito ao corpo da mancha, os processos de degradação serão mais acentuados sobre as bolhas.

Este processo depende basicamente das condições de turbulência do local e o tamanho das bolhas desprendidas, depende do tamanho dos vórtices. Geralmente os vórtices de menor escala tendem a causar o desprendimento, enquanto os maiores transportam verticalmente as bolhas na coluna d'água. O afundamento e reflutuação das bolhas depende do balanço entre o arraste causado pela turbulência e as forças de flutuação. As bolhas que atingem a superfície novamente são reincorporadas à mancha, as outras são afetadas por processos de degradação, favorecidos pela maior relação superfície-volume, *i.e.*, quanto menores são as bolhas mais rapidamente são degradadas e, portanto, possuem menos possibilidades de se reincorporar à mancha. Devemos esclarecer que a dispersão não é um processo de degradação como evaporação, emulsificação etc., mas é um processo físico pelo qual são desprendidas porções de óleo com a mesma composição que a mancha. Logo, estas porções serão afetadas pelos outros processos de degradação.

Floculação (*sinking*): Quando a densidade relativa do óleo é em torno de 1, este começa a afundar formando bolhas (flóculos) por causa da tensão superficial. Isto acontece comumente quando óleos pesados são derramados em regiões onde as temperaturas das águas são baixas.

Outro processo que causa o afundamento do óleo é a *sedimentação* que é o processo de aderência do óleo às partículas suspensas na coluna de água. Estas partículas aumentam a densidade do óleo fazendo com que este afunde. Quanto mais denso é o óleo, mais propenso à sedimentação ele é. Este processo, similarmente que a dispersão, tende a introduzir óleo na coluna de água, mas se distingue daquele pelas forças que desprendem as bolhas. No primeiro caso o desprendimento é causado por tensões turbulentas, enquanto que neste caso as forças que atuam são forças de gravidade.

Emulsificação: É o processo de formação de emulsões de água em óleo comumente chamadas de *mousse de chocolate*. Este processo, embora não seja geralmente levado em conta em modelos de trajetória, devido a sua alta complexidade, repercute fortemente na hidrodinâmica dos derrames pelo fato de modificar de forma considerável as propriedades do óleo como densidade e viscosidade. Ainda, este processo pode aumentar em até 4 ou 5 vezes o volume em relação ao volume inicial do derrame com a conseqüente repercussão no balanço global de massa. Alguns

modelos levam em consideração a emulsificação, utilizando na maioria dos casos o modelo proposto por Mackay *et alii* (1980). Neste modelo a taxa de água incorporada na emulsão é avaliada como função da velocidade do vento, conteúdo atual de água na emulsão e um coeficiente que depende do tipo de óleo. Logo, devem ser utilizadas correlações para avaliar as propriedades físicas do óleo em função do conteúdo de água no mesmo.

Nas Figuras Fig. 2.7 e Fig. 2.8, extraídas de Doerffer (1992), se observa a dependência da densidade e viscosidade com o tempo de exposição da mancha de petróleo devido ao processo de emulsificação. Os dados foram obtidos através de experiências em tanques de ondas.

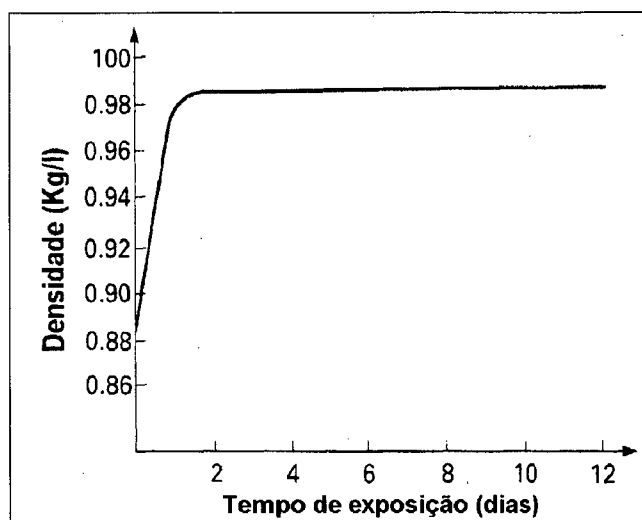


Fig. 2.7: Variação da densidade com o tempo de exposição

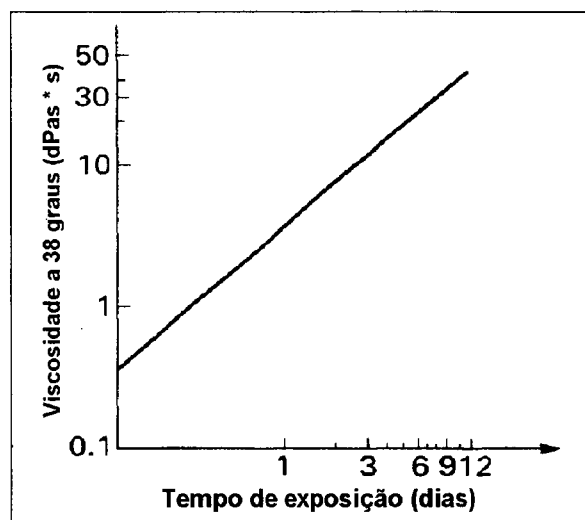


Fig. 2.8: Variação da viscosidade com o tempo de exposição

Interação com as linhas de costa: Quando o avanço da mancha de óleo atinge uma linha de costa, acontecem vários fenômenos de difícil estudo e modelagem. Sabemos que o escoamento costeiro muda totalmente na região de arrebatamento, o qual influi fortemente no transporte do óleo. O óleo incorpora sedimentos da costa o qual muda suas propriedades físicas. Inclusive, fazem com que parte deste afunde. O óleo penetra na costa fazendo com que esta diminua sua capacidade de reter óleo. Logo, parte do óleo que atinge a linha de costa, é retido e parte é rejeitado. A proporção rejeitada vai aumentando com o tempo conforme a costa vai “saturando-se” de óleo ou seja vai perdendo a capacidade de reter óleo. Modelos do tipo de “vida média” que são típicos de fenômenos de saturação, são utilizados para

avaliar os fatores de rejeição com o tempo. Estes fatores representam a proporção retida ou rejeitada do volume de óleo que atinge a costa.

Estando descritos os fenômenos, podemos ver que uma modelação matemática completa envolvendo todos eles é de difícil implementação. Simplificações e hipóteses devem ser feitas para que resulte em um modelo matemático tratável e de utilização em engenharia ambiental.

No próximo capítulo, se apresentará brevemente o estado-da-arte da modelagem destes fenômenos e descrever-se-á como se pretende realizar a modelagem dos fenômenos a serem considerados neste trabalho.

3. Modelos Matemáticos

Existem diferentes tipos de modelos de derrames de petróleo e os vários autores os classificam de distintas maneiras. Mackay *et alii* (1980) classifica os modelos de derrames de petróleo em **modelos de comportamento** os quais consideram os processos físico-químicos que acontecem no derrame como , evaporação, diluição, emulsificação, etc., os **modelos de trajetória** que procuram prever a posição da mancha de petróleo com intuito de combater a poluição e previsão de riscos potenciais e os **modelos de concentração na coluna de água** que procuram quantificar a distribuição do óleo, em forma de flóculos, dentro da coluna de água. Fingas e Sydor (1980), classificam os modelos dependendo da região que estes abrangem, como os modelos “**micro**” que se aplicam a pequenas áreas como portos ou rios e os “**macro**” que são aplicáveis a áreas maiores como costas, baías, etc.. Outra classificação é dada por Stolzembach *et alii* (1977) que distingue o enfoque dado na avaliação da trajetória da mancha dependendo se o movimento do óleo é causado pelo espalhamento próprio do óleo através das forças de gravidade e tensão superficial (**modelos de espalhamento**), ou causado pelas tensões cisalhantes no topo e no fundo da mancha devidas às correntes e os ventos (**modelos de dispersão**). Deve-se esclarecer que esta classificação é antiga e, na época, os modelos de dispersão estavam começando a surgir. Atualmente, quase todos os modelos consideram o espalhamento e arraste do óleo.

Os primeiros modelos desenvolvidos na área, Fay (1969, 1971), Fannelop e Waldman (1971), Hault (1972), DiPietro *et alii* (1978), etc., enquadram-se na classificação de modelos de espalhamento, já que estes modelos, em alguns casos extremamente sofisticados, propõem soluções analíticas e numéricas para o espalhamento do óleo em águas calmas, isto é, estes modelos não consideram o transporte da mancha de óleo. Os modelos atuais, procuram através de enfoques Lagrangeanos ou Eulerianos, a quantificação de todos os fenômenos que acontecem em um derrame, ou seja, são combinação vários tipos de modelos e procuram,

geralmente, quantificar a dispersão e o espalhamento da mancha. Ainda alguns deles incluem modelos de comportamento para avaliar fenômenos como evaporação emulsificação, etc., já que estes fenômenos influem, através da transferência de massa, na trajetória da mancha. Mas, deve-se deixar claro que a maioria dos modelos atuais tem como objetivo a avaliação da trajetória das manchas de petróleo e é este o objetivo do presente trabalho.

Apresentaremos, a seguir, o estado-da-arte da modelagem matemática e numérica de trajetórias de derrames de petróleo. Logo após apresentaremos o modelo proposto neste trabalho.

3.1 Estado-da-arte

Como em todo problema de mecânica dos fluidos, dois enfoques básicos podem ser utilizados para a modelagem matemática, enfoque Lagrangeano e enfoque Euleriano. Estes enfoques, aplicados a modelos de trajetória de derrames de petróleo, são descritos a seguir:

3.1.1 Modelos Lagrangeanos

Os modelos Lagrangeanos são geralmente baseados na hipótese de que a mancha pode ser dividida em pequenas parcelas que não interagem umas com outras. A trajetória destas parcelas é calculada a partir de uma velocidade total de arraste que é função da velocidade do vento e das correntes. Esta velocidade será descrita em detalhe logo mais. Para cada passo temporal é calculada a posição de cada parcela, a partir da posição inicial, através de uma equação do tipo:

$$\Delta \vec{S} = \sum_k \vec{V}_k \delta t_k \quad (3.1)$$

Onde $\Delta \vec{S}$ é o deslocamento da parcela no tempo δt e \vec{V} é a velocidade de arraste.

Uma vez computada a trajetória das parcelas, existem, segundo a ASCE (Task Committee on Modeling Oil Spills, 1996), duas formas de avaliar o espalhamento, geralmente através das fórmulas deduzidas por Fay (1969) ou modificações das

mesmas. Uma é avaliar o espalhamento de cada parcela como se fosse uma pequena mancha se espalhando axi-simetricamente, e outra é reconstruir a mancha e aplicar as fórmulas de espalhamento unidimensional ou axi-simétrico, dependendo do aspecto da mancha. Se esta for alongada, se divide em pequenas fatias às quais são aplicadas as fórmulas de espalhamento unidimensional, se for aproximadamente circular é dividida em porções com forma de setor circular e as fórmulas de espalhamento axi-simétrico são aplicadas a cada porção.

Estas fórmulas de espalhamento foram deduzidas para manchas com formas idealizadas, isto é, circulares ou retangulares, mas o espalhamento nas pequenas parcelas pode ser considerado unidimensional ou axi-simétrico, sem maiores erros. No caso de um derrame real, a forma da mancha dista muito de ser circular, alongando-se no sentido das correntes e dos ventos. Portanto o erro seria grande se fosse considerado que a mancha inteira se espalhasse axi-simetricamente com o centro de massa deslocando-se com a velocidade de arraste, como considerado por Hault (1972).

Conhecendo as novas posições das parcelas e o espalhamento das mesmas, é possível calcular a superfície total da mancha, através da qual, é computada a transferência de massa ao meio por evaporação, floculação, diluição, etc.

3.1.2 Modelos Eulerianos

Muitos modelos Eulerianos atuais são baseados em uma equação de convecção-difusão de espécies, utilizando como velocidade de convecção uma velocidade de arraste que é função da velocidade da água e do vento. Nestes modelos, os termos convectivos representam o arraste exercido pelos ventos e as correntes marinhas, enquanto os termos difusivos representam o espalhamento do óleo devido à gravidade e dispersão turbulenta. Estes modelos são válidos apenas na segunda fase do espalhamento, conforme descrito no capítulo anterior, na qual as forças viscosas equilibram às de gravidade. Dentre estes modelos, um dos mais utilizados é o modelo da *Canadian Atmospheric and Environment Service* (AES) apresentado em Venkatesh (1988), onde é utilizada uma equação do tipo,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla c = \nabla(K_h \nabla c) + S \quad (3.2)$$

onde \vec{V} é a velocidade total de transporte, c é a concentração ou espessura da mancha de óleo, K_h é um coeficiente de difusividade que depende das condições de correntes e ventos no local e S representa as fontes ou sumidouros de massa de óleo ou seja os processos como evaporação, floculação e as fontes poluentes. Outros modelos Eulerianos são geralmente baseados em equações similares.

Deve-se destacar que este enfoque, mesmo que obtendo-se bons resultados, é fisicamente inconsistente já que o petróleo é imiscível em água e o problema deveria ser tratado como um fluido escoando sobre outro (óleo sobre água), tal como será tratado no presente trabalho, e não como um poluente difundindo-se e sendo transportado pela água, como acontece em escoamentos monofásicos de mais de um componente.

Um modelo fisicamente mais consistente, pelo fato de aplicar as equações do movimento à mancha de óleo, é o apresentado por Benqué *et alii* (1982). Nesse modelo é feito um balanço entre as forças viscosas, ou seja, as tensões cisalhantes no topo e fundo da mancha, e a força da gravidade para as equações do movimento e é utilizada a equação da conservação da massa de óleo. As equações apresentadas nesse trabalho são,

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(uh)}{\partial x} + \frac{\partial(vh)}{\partial y} = 0 \quad (3.3)$$

$$\rho \Delta g h \frac{\partial h}{\partial x} = \tau_{wx} + C_f^{água} (U_c - u) \quad (3.4)$$

$$\rho \Delta g h \frac{\partial h}{\partial y} = \tau_{wy} + C_f^{água} (V_c - v) \quad (3.5)$$

onde h é a espessura da mancha de óleo, ρ a densidade do óleo, g a aceleração da gravidade e Δ a relação entre as densidades do óleo e água que será definida logo mais (ver Eq. (3.28)).

O termo $C_f^{água}(\mathbf{V}_{C_i} - \mathbf{u}_i)$ representa a tensão cisalhante entre o óleo e a água. Isolando as velocidades u e v das equações do movimento, Eq. (3.4) e Eq. (3.5), e substituindo na equação da conservação da massa, Eq. (3.3), e considerando a tensão exercida pelo vento sobre o óleo proporcional à velocidade do vento, obtém-se a seguinte equação para a espessura da mancha de óleo

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(V_x h)}{\partial x} + \frac{\partial(V_y h)}{\partial y} = C \nabla^2 h^3 \quad (3.6)$$

onde \vec{V} é a velocidade total de transporte e C é um coeficiente tipo “difusivo”, definido como,

$$C = \frac{1}{3} \frac{\rho \Delta g}{C_f^{água}} \quad (3.7)$$

O fato de se transformar o sistema original de três equações, Eq. (3.3), Eq. (3.4) e Eq. (3.5) numa única equação traz vantagens do ponto de vista da resolução numérica do problema, mas obriga as tensões cisalhantes no topo e fundo da mancha a serem proporcionais às velocidades do vento e da água, respectivamente, o que pode limitar bastante a aplicação do modelo. Ainda, este modelo desconsidera as forças inerciais as quais podem ser de importância nas primeiras horas após do derrame, dependendo do volume derramado.

Provavelmente, este modelo permite explicar a possibilidade de utilizar equação do tipo da Eq. (3.2) para avaliar a distribuição de óleo na superfície d’água, já que possui certa similaridade com a Eq. (3.6), exceto pelo fato que a espessura no termo difusivo aparece elevada ao cubo. Inclusive, a Eq. (3.6) pode ser vista como uma equação de convecção-difusão com o coeficiente de difusividade proporcional a h^2 .

A explicação reside no fato que nos modelos baseados numa equação de convecção-difusão, similarmente ao modelo de Benqué *et alii* (1982), os termos convectivos representam o arraste do óleo por parte das correntes e dos ventos e os termos difusivos representam o espalhamento do óleo devido à gravidade. Deve-se deixar claro, entretanto, que a Eq. (3.6) é obtida a partir da combinação das equações da conservação da massa e quantidade de movimento. A literatura é, em geral, bastante confusa a este respeito

Um modelo similar ao de Benqué *et alii* (1982), porquanto que também utiliza as equações do movimento aplicadas à mancha de óleo, porém mais sofisticado, é o apresentado por Hess e Kerr (1979). Este modelo considera as acelerações locais do óleo, a força de gravidade e as tensões atuantes no topo e fundo da mancha. Quando são aplicadas as condições de contorno, a tensão superficial é considerada atuando na interface água-óleo-ar. São desprezadas as tensões viscosas internas do óleo e as acelerações convectivas. Tampouco são consideradas nesse modelo os processos de transferência de massa com a água ou ar como evaporação, diluição, etc.. As equações que representam a conservação da massa e quantidade de movimento, resolvidas nesse trabalho são

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{u}_i h)}{\partial \mathbf{x}_i} = 0 \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial(h\mathbf{u}_i)}{\partial t} = -\rho\Delta gh \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}_i} + \boldsymbol{\tau}^T_i - \boldsymbol{\tau}^B_i \quad (3.9)$$

onde o sub-índice i varia de 1 a 2 já que são consideradas as variações horizontais das variáveis.

As tensões cisalhantes no topo e fundo da mancha são avaliadas respectivamente como:

$$\boldsymbol{\tau}^T_i = \rho_{ar} C_f^{vento} \left| \vec{V}^{vento} \right| \mathbf{V}_i^{vento} \quad (3.10)$$

$$\boldsymbol{\tau}_i^B = \rho_{\text{água}} C_f \left| \vec{V}^{\text{Óleo}} - \vec{V}^{\text{água}} \right| (\mathbf{u}_i - \mathbf{V}_i^{\text{água}}) \quad (3.11)$$

Como veremos mais a frente, o modelo a ser utilizado neste trabalho possui grande similaridade com o modelo de Hess e Kerr (1979), mas serão considerados os termos convectivos, as tensões internas do óleo e a evaporação.

3.1.3 Velocidade total de transporte

A seguir, se descreverá a Velocidade Total de Transporte e, embora este conceito não seja utilizado na modelagem do presente trabalho, é importante a sua descrição já que muitos modelos, Eulerianos e Lagrangeanos, presentes na literatura o utilizam.

Esta velocidade representa o transporte total exercido pelas correntes marinhas e pelo o vento sobre a mancha de óleo e é geralmente na literatura calculada com uma equação do tipo,

$$\vec{V}_{\text{Transporte}} = \alpha_1 \vec{V}_{\text{Vento}} + \alpha_2 \vec{V}_{\text{Água}} \quad (3.12)$$

A critério do autor existe alguma confusão na literatura acerca dos efeitos do vento sobre o espalhamento da mancha. Esta confusão surge pelo fato de não separar-se, no equacionamento, os efeitos do vento sobre o corpo de água que rodeia a mancha e sobre a própria mancha. Uma boa descrição das componentes da velocidade de transporte é dada no trabalho de Beer *et alii* (1983). Nesse trabalho o objetivo principal é avaliar a dispersão causada pelo vento sobre a mancha de óleo, o que é feito através de medições em derrames controlados. A equação para a velocidade de transporte apresentada é

$$\vec{V}_{\text{Transporte}} = \vec{V}_{\text{Sup}} + f \vec{V}_{\text{Vento}} + \vec{V}_{\text{Ind}} \quad (3.13)$$

Onde \vec{V}_{Sup} , é a velocidade na superfície da água induzida por outras causas que não o vento (marés, correntes residuais, etc.), \vec{V}_{Ind} , é a velocidade induzida pelo vento

na superfície da água e $f\vec{V}_{vento}$, representa o arraste do vento sobre a própria mancha. No contexto da modelagem de trajetória de derrames de petróleo, os dois últimos termos da Eq. (3.13) podem-se juntar num único, já que em geral a velocidade \vec{V}_{Ind} é avaliada como sendo uma porcentagem da velocidade do vento, mas é importante que a distinção seja feita. Logo, a velocidade total de transporte, pode ser calculada com uma equação do tipo da Eq. (3.12).

3.2 Modelo Proposto

No presente trabalho se propõe um modelo quase-tridimensional baseado nas equações de Navier-Stokes aplicadas à mancha de óleo. As equações governantes são obtidas através da integração das equações de Navier-Stokes na espessura da mancha. Com já foi comentado, este modelo é similar a aquele apresentado por Hess e Kerr (1979).

Segundo Hout (1972), uma aproximação válida é considerar a viscosidade do óleo muito maior do que a viscosidade da água. Em geral os valores de $\mu_{Água} / \mu_{Óleo}$ são menores que 1/20. Portanto, os gradientes de velocidade na direção vertical da mancha de óleo, serão muito menores do que os gradientes de velocidade na água. A mesma consideração pode ser feita para a parte superior da mancha com respeito ao vento. Logo, uma boa aproximação é resolver as equações governantes em duas dimensões utilizando como variáveis dependentes as velocidades integradas na espessura da mancha.

Um modelo com estas características representa adequadamente a física do transporte e espalhamento da mancha de petróleo, além de incluir os efeitos inerciais que geralmente não são levados em conta na modelagem de derrames de petróleo.

3.2.1 Integração das equações

Na Fig. 3.1, são mostradas as variáveis consideradas na integração das equações governantes, ao longo da espessura da mancha.

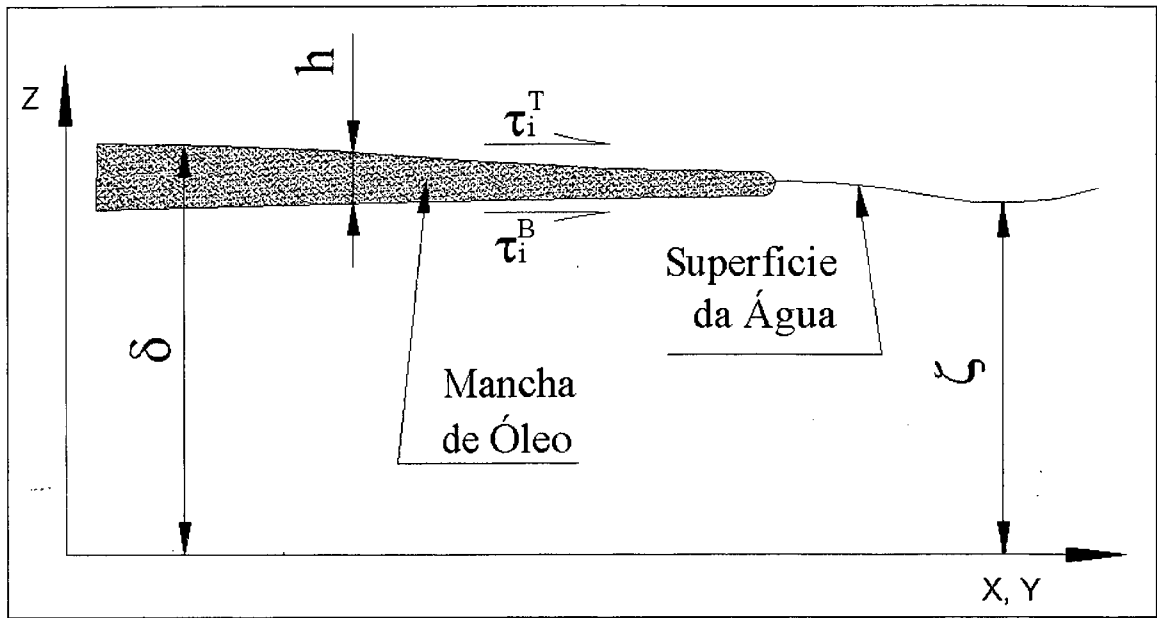


Fig. 3.1: Esquema mostrando os parâmetros considerados na integração das equações.

A Fig. 3.1, mostra esquematicamente uma porção de uma mancha de óleo, espalhando-se e sendo arrastada pelas correntes e ventos. A variação temporal da superfície média da água ζ ; é tratada através de uma média temporal que não considera a variação devida a ondas de alta freqüência, mas apenas as ondas de maré. Os efeitos das ondas de alta freqüência sobre a mancha são fenômenos de grande complexidade se quiserem ser estudados em forma localizada. As ondas de alta freqüência provocam a chamada deriva de Stokes³, fenômeno que provoca um movimento superficial d'água. Portanto, estas ondas serão consideradas através do aumento da velocidade superficial d'água, aumentando assim o arraste sobre a mancha de óleo.

As equações de conservação da massa e quantidade de movimento para um escoamento isocórico são

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{3.14}$$

³ Uma descrição detalhada pode-se encontrar no Livro de Kundu (1990), Cap. 7.

$$\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial(\tau_{ij})}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (3.15)$$

A notação indicial⁴ será utilizada ao longo da dedução para simplificar a manipulação algébrica.

Na integração das equações de conservação na espessura da mancha utiliza-se um procedimento similar ao mostrado por Bortolon (1997).

Integrando utilizando a regra de Leibniz temos, para a equação da conservação da massa,

$$\int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial x_i} dz + \int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial w}{\partial z} dz = 0 \quad (3.16)$$

Para uma variável ϕ qualquer, definimos a média integral como

$$\bar{\phi} = \frac{1}{h} \int_{\zeta}^{\delta} \phi(x_i, t) dz \quad (3.17)$$

Logo,

$$\frac{\partial(\bar{\mathbf{u}}_i h)}{\partial x_i} - \mathbf{u}_i \frac{\partial \delta}{\partial x_i} \Big|_{\delta} + \mathbf{u}_i \frac{\partial \zeta}{\partial x_i} \Big|_{\zeta} + w \Big|_{\delta} - w \Big|_{\zeta} = 0 \quad (3.18)$$

uma vez que,

$$w \Big|_{\delta} = \frac{d\delta}{dt} = \frac{\partial \delta}{\partial t} \Big|_{\delta} + \mathbf{u}_i \frac{\partial \delta}{\partial x_i} \Big|_{\delta} \quad (3.19)$$

e, similarmente para $w \Big|_{\zeta}$. Levando em conta também que,

$$\delta - \zeta = h \quad (3.20)$$

obtemos a equação da massa integrada na vertical, dada por

⁴ Os índices variam de 1 a 2 já que as equações resultantes terão duas variáveis independentes.

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\mathbf{u}}_i h)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.21)$$

Integrando agora a equação da conservação Quantidade de Movimento ao longo da espessura da mancha temos

$$\int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial(\rho \mathbf{u}_i)}{\partial t} dz + \int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial(\rho \mathbf{u}_j \mathbf{u}_i)}{\partial x_j} dz + \int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial(\rho \mathbf{u}_i w)}{\partial z} dz = \int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial(\tau_{ij})}{\partial x_i} dz + \int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial(\tau_{iz})}{\partial z} dz - \int_{\zeta}^{\delta} \frac{\partial p}{\partial x_i} dz \quad (3.22)$$

Aplicando a regra de Leibniz, e levando em conta a Eq. (3.17) tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \bar{\mathbf{u}}_i h)}{\partial t} - \rho \mathbf{u}_i \Big|_{\delta} \frac{\partial \delta}{\partial t} + \rho \mathbf{u}_i \Big|_{\zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{\mathbf{u}}_i \bar{\mathbf{u}}_j h)}{\partial x_j} - \\ \rho \mathbf{u}_j \mathbf{u}_i \Big|_{\delta} \frac{\partial \delta}{\partial x_i} + \rho \mathbf{u}_j \mathbf{u}_i \Big|_{\zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x_i} = \frac{\partial(\bar{\tau}_{ij} h)}{\partial x_i} - \tau_{ij} \Big|_{\delta} \frac{\partial \delta}{\partial x_i} + \\ \tau_{ij} \Big|_{\zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x_i} + \tau_{iz} \Big|_{\delta} - \tau_{iz} \Big|_{\zeta} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Na equação anterior foi considerado que a média do produto é igual ao produto das médias. Esta hipótese é válida enquanto as variações na vertical não sejam significativas (Bortolon (1997)).

Se analisarmos a componente do tensor de tensão, τ_{ij} normal a superfície, temos,

$$\bar{\tau} \cdot \vec{n} \Big|_{\delta} = \tau_{ij} n_j \Big|_{\delta} + \tau_{iz} n_z \Big|_{\delta} = \tau_i^T \quad (3.24)$$

onde o vetor normal à superfície superior é dado por

$$\vec{n} = \frac{\partial \delta}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial \delta}{\partial x} \hat{j} - \hat{k} \quad (3.25)$$

e similarmente deve ser feito para a tensão na superfície inferior da mancha. Deve-se esclarecer que neste caso τ_{ij} é a componente cisalhante do tensor de tensão, já que a

componente de pressão é considerada separadamente. Considerando agora, apenas a componente hidrostática da pressão tem-se

$$p = p_0 + \rho g(\delta - z) \quad (3.26)$$

A altura do topo da mancha é dada pela relação

$$\delta = \zeta + h\Delta \quad (3.27)$$

onde

$$\Delta = \frac{(\rho_{\text{agua}} - \rho)}{\rho_{\text{agua}}} \quad (3.28)$$

é a relação de densidades do óleo e a água e indica as espessuras de óleo por cima e por baixo da superfície média da água em relação à espessura total h . Logo, o gradiente de pressão é dado por

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = \rho g h \left(\Delta \frac{\partial h}{\partial x_i} + \frac{\partial \zeta}{\partial x_i} \right) \quad (3.29)$$

O primeiro termo corresponde à ação da gravidade sobre o óleo e é exatamente igual ao termo de empuxo gravitacional deduzido por Fay (1969) ou Hoult (1972) embora tenha sido obtido segundo um procedimento algébrico diferente. O segundo termo corresponde ao empuxo que aparece pelo fato da superfície da água não ser horizontal (*e.g.* ondas de maré).

Para avaliar as tensões cisalhantes médias $\bar{\tau}_{ij}$, podemos considerar, em princípio, que o óleo se comporta como um fluido newtoniano. Esta hipótese é válida já que os gradientes de velocidades são baixos e a relação tensão-velocidade de deformação pode ser considerada linear. Opta-se então por usar a forma utilizada por Stelling e Wang (1984) que trabalharam com águas rasas⁵. Esta relação é

$$\frac{\partial(\bar{\tau}_{ij}h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(h\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.30)$$

⁵ Aproveitamos aqui para fazer notar a similaridade destas equações com as de Águas Rasas.

Onde μ é a viscosidade efetiva, representando as tensões viscosas e turbulentas. Rigorosamente falando, no caso de se considerarem as tensões turbulentas dentro da mancha de óleo, deveriam ser utilizados modelos de turbulência para avaliar esta viscosidade, mas, foi visto através dos resultados de simulações que estes termos são desprezíveis frente aos restantes, inclusive para grandes valores de viscosidade. O autor acredita que isto se deve ao fato que os gradientes de velocidade horizontais são muito pequenos, (já que as dimensões horizontais da mancha são muito grandes) e as velocidades muito pequenas. Devido ao tipo de função de interpolação que será utilizada na solução numérica, estes termos devem ser incluídos no modelo para tornar a solução estável, mas a viscosidade será considerada constante e, portanto, não serão levadas em conta as tensões turbulentas horizontais. O estudo destes efeitos turbulentos deverá ser objeto de futuras pesquisas.

A Fig. 3.2, tem como objetivo mostrar a independência da trajetórias seguida pela mancha de óleo, da viscosidade. Foi feita uma simulação para uma mancha inicialmente circular se espalhando e sendo arrastada por uma corrente constante na direção x de 0.5 m/s . Foi considerada uma geometria retangular, bem estreita na direção y (Note que o gráfico está fora de escala), de forma que os efeitos viscosos se propaguem rapidamente na largura. Os resultados são mostrados para viscosidades do óleo de $1.0\text{ Pa}\cdot\text{s}$ e $1000\text{ Pa}\cdot\text{s}$. Note que as isolinhas são praticamente coincidentes com uma pequena diferença perto das paredes.

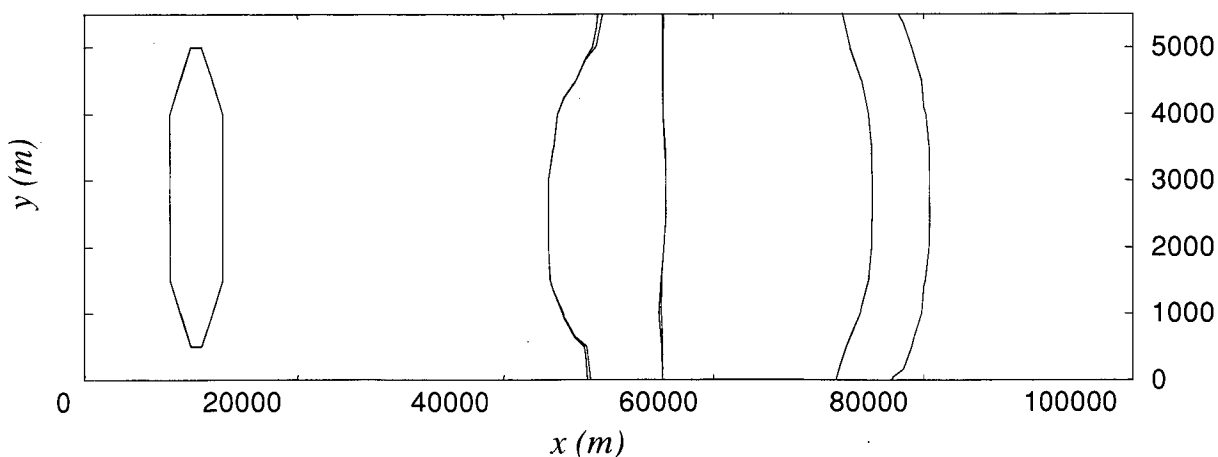


Fig. 3.2: Comparação da posição da mancha para diferentes viscosidades, mostrando as isolinhas de espessura de $1 \times 10^{-4}\text{ m}$ e $1 \times 10^{-6}\text{ m}$. Se mostra a posição inicial da mancha e a posição para 30 h de simulação.

Finalmente, substituindo a Eqs. (3.24), (3.29) e (3.30) na Eq. (3.23) e levando em conta a Eq. (3.19), obtemos a equação da conservação da quantidade de movimento para o óleo como sendo

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\mathbf{u}}_i h)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\mathbf{u}}_i \bar{\mathbf{u}}_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(h\mu \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial x_j} \right) + \tau_i^T - \tau_i^B - \rho g h \left(\Delta \frac{\partial h}{\partial x_i} + \frac{\partial \zeta}{\partial x_i} \right) \quad (3.31)$$

As tensões cisalhantes no topo e fundo da mancha, serão calculadas supondo que o vetor normal a ambas superfícies é vertical. Logo, podemos utilizar fórmulas do tipo

$$\tau_i^T = C_f^{vento} \mathbf{u}_i^{vento} \quad (3.32)$$

$$\tau_i^B = C_f^{agua} \left(\mathbf{u}_i^{oleo} - \mathbf{V}_i^{agua} \right) \quad (3.33)$$

Estes modelos para as tensões exercidas pela água e o vento sobre a mancha de óleo são extraídos do trabalho de Benqué *et alii* (1982), e consideram a tensão como dependente linearmente da velocidade relativa entre o óleo e a água, para o caso da tensão no fundo da mancha, e proporcional à velocidade do vento medida a 10 m da superfície d'água, para a tensão na superfície superior da mancha. Estes modelos diferem do modelo utilizado por Hess e Kerr (1979) onde as tensões cisalhantes entre o óleo e a água e o óleo e o vento são dadas pelas Eqs. (3.10) e (3.11). Com a abordagem sendo utilizada aqui pode ser usada qualquer equação para avaliar esta tensão.

No capítulo 5 onde são apresentados resultados de simulações, serão testados diferentes formas de avaliar a tensão entre água e óleo. Mesmo assim, a forma de avaliar a tensão exercida pela água sobre a mancha de óleo, é uma questão que deve ser estudada com maior profundidade em trabalhos futuros devido à complexidade do fenômeno e à sua grande influência na avaliação da trajetória da mancha.

Se o problema for abordado tri-dimensionalmente não existiriam velocidades relativas, já que se deveriam igualar as velocidades e as tensões de cisalhamento nas interfaces, que seriam as condições de contorno. Neste caso os campos de

velocidades das correntes marinhas e os ventos serão resolvidos separadamente, considerando-se que a presença de óleo não afeta estes escoamentos. Este último fato é comumente considerado nos modelos atuais (ASCE, 1996). É comum ainda utilizar dados obtidos através de prognósticos e medições em campo já que a modelagem de escoamentos marinhos e atmosféricos, fundamentalmente estes últimos, é de relativa complexidade.

3.2.2 Análise das equações governantes

O objetivo desta secção é analisar o que representa cada termo das equações deduzidas e obter, a partir da análise de ordens de grandeza das mesmas, as correlações de Fay (1969) para os regimes gravitacional-inercial e gravitacional-viscoso, que são os regimes considerados neste modelo. Para isto devem-se fazer as mesmas hipóteses simplificativas feitas nesse trabalho.

Fazendo uma análise de ordem de grandeza das equações da quantidade de movimento, é possível ver quais são as forças que dominam o espalhamento da mancha de óleo em função da sua espessura. Observando as equações, vemos que existem três forças atuando sobre as partículas de óleo: forças inerciais, viscosas e de gravidade.

- **Inércia:**

Como as velocidades do óleo são muito baixas, para o espalhamento axi-simétrico, os termos advectivos onde a velocidade aparece multiplicada por si mesma, são muito menores que o termo de aceleração local,

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i h)}{\partial t} \gg \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j h)}{\partial x_i}$$

portanto, de acordo com a análise de ordem de grandeza, os primeiros podem ser desprezados, resultando em,

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j h)}{\partial x_i} \sim \rho \frac{\mathbf{u}h}{t} \tag{3.34}$$

- **Viscosidade:**

Os termos viscosos podem ser divididos em duas partes, as tensões no topo e fundo da mancha exercidas pelos ventos e movimentos d'água, e as forças viscosas internas à mancha de óleo devidas a gradientes de velocidade horizontais. Estas últimas são de pequena magnitude já que os gradientes de velocidade horizontais são em geral pequenos. Este fato já foi mostrado na Fig. 3.2. Logo, as tensões no topo e fundo da mancha são muito maiores do que as tensões internas.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(h\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \ll \tau_i^T - \tau_i^B$$

Fay (1969) propõe a tensão cisalhante dada pelo arraste d'água como sendo

$$\tau \sim \mu \frac{\mathbf{u}}{\delta_h}$$

onde δ_h é a espessura da camada limite da água por baixo da mancha de óleo.

A análise feita por Fay, considera a mancha de óleo se espalhando em águas calmas, portanto a camada limite na água, se estabelece a partir do movimento do óleo que arrasta a água por baixo da mancha originando assim o estabelecimento de uma camada limite transiente, logo, δ é da ordem de

$$\delta_h \sim \sqrt{\nu t}$$

Portanto, a ordem de grandeza dos termos viscosos é

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(h\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) + \tau_i^T - \tau_i^B \sim \mu \frac{\mathbf{u}}{\sqrt{\nu t}} \quad (3.35)$$

- **Gravidade:**

A força de gravidade atua gerando gradientes de pressão horizontais devido aos gradientes de espessura da mancha. A ordem de grandeza desta força, pode ser avaliada como

$$\rho g h \Delta \frac{\partial h}{\partial x_i} \sim \rho g h \Delta \frac{h}{L} \quad (3.36)$$

onde L é uma dimensão característica horizontal da mancha. No caso do espalhamento axi-simétrico, L pode ser tomado como o raio da mancha.

Fazendo agora um balanço entre as forças descritas, podem-se obter correlações para o espalhamento da mancha nos diferentes regimes de espalhamento. Para um balanço entre gravidade e inércia, temos:

$$\rho \frac{\mathbf{u}}{t} \sim \rho g h \Delta \frac{h}{L} \quad (3.37)$$

O comprimento característico L pode ser expressado como função do volume de óleo na superfície da água através da relação $V \sim L^2 h$, facilitando a análise quando se trata de um derrame instantâneo de um determinado volume de óleo, como o caso analisado por Fay (1969). Ainda, para colocar todos os termos em função das mesmas variáveis, podemos aproximar a velocidade do óleo como $\mathbf{u} \sim L/t$. Finalmente, o raio da mancha, para a etapa gravitacional-inercial fica

$$R = K_{g-i} (\Delta g V t^2)^{1/4} \quad (3.38)$$

Fazendo-se a mesma análise para a etapa onde as forças viscosas predominam sobre as inerciais, o raio da mancha pode ser avaliado como

$$R = K_{g-v} \left(\frac{\Delta g V^2 t^{3/2}}{\nu^{1/2}} \right)^{1/6} \quad (3.39)$$

onde as constantes de proporcionalidade, K podem ser obtidas empiricamente ou através de modelos analíticos. Existem numerosos trabalhos (Fannelop e Waldman, 1971, Hout, 1972, Buckmaster, 1973, DiPietro *et alii*, 1978) que procuram avaliar estes coeficientes através de modelos analíticos unidimensionais ou empiricamente.

As fórmulas precedentes foram deduzidas por Fay (1969) e revisadas em Fay (1971), e ainda em modelos atuais seguem sendo utilizadas. Por exemplo, como foi

mencionado anteriormente, em modelos Lagrangeanos estas fórmulas são utilizadas para avaliar o espalhamento das parcelas individuais em que é dividida a mancha.

4. Formulação Numérica

Observa-se que as equações governantes do modelo apresentado no capítulo anterior são similares às utilizadas na modelagem de escoamentos em águas rasas. Logo, podem ser utilizadas metodologias numéricas empregadas na resolução deste tipo de escoamentos. Neste contexto, será utilizada uma metodologia apresentada por Casulli e Cheng (1992), que consiste na resolução semi-implícita das equações de conservação da massa e quantidade de movimento, isto é, as elevações são avaliadas de forma implícita e as velocidades de forma explícita. A metodologia empregada nesse trabalho para discretização espacial das equações foi o método das diferenças finitas.

Visando a possibilidade da modelagem em regiões costeiras, e com o objetivo do fácil tratamento das complexas geografias destas regiões através da geração de malhas, serão feitas modificações na metodologia apresentada por Casulli e Cheng(1992). O modelo numérico será desenvolvido utilizando-se o método dos volumes finitos em coordenadas curvilíneas generalizadas e arranjo co-localizado. Esta forma de armazenamento das variáveis permite um tratamento mais simples das mesmas em referência a implementação do código computacional, fundamentalmente quando se trata de discretização em coordenadas generalizadas (Marchi e Maliska, 1994).

Apresenta-se a seguir a transformação das equações para coordenadas curvilíneas generalizadas. Na seqüência será descrita a metodologia de resolução apresentada por Casulli e Cheng (1992) introduzindo-se as modificações necessárias para a sua discretização pelo método dos volumes finitos em coordenadas generalizadas e arranjo co-localizado. Finalmente será dedicada uma seção para descrever como será considerada a evaporação do óleo neste modelo.

4.1 Transformação das equações governantes

Escrevendo as equações de conservação (Eqs. (3.21) e (3.31)) em forma geral para um domínio cartesiano conforme feito por Patankar (1980) ou Maliska (1995), temos

$$\frac{\partial(\rho h \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho h u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho h v \phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(h \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(h \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S^\phi \quad (4.1)$$

Na equação acima fazendo-se

$$\phi = 1 \qquad \Gamma^\phi = 0 \qquad S^\phi = 0$$

obtemos a equação da conservação da massa.

Fazendo,

$$\phi = u \qquad \Gamma^\phi = \mu \qquad S^\phi = \tau_x^T - \tau_x^B - \rho g h \left(\Delta \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)$$

obtemos a equação da conservação da quantidade de movimento em x , e com

$$\phi = v \qquad \Gamma^\phi = \mu \qquad S^\phi = \tau_y^T - \tau_y^B - \rho g h \left(\Delta \frac{\partial h}{\partial y} + \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right)$$

obtemos a equação da conservação da quantidade de movimento em y .

O fato de escrever as equações desta forma facilita grandemente a manipulação das mesmas tanto na transformação de coordenadas quanto na discretização numérica.

Apresentadas as equações desta forma, podem-se aplicar as transformações descritas em Maliska (1995, Cap. 14) obtendo-se a equação geral para o domínio transformado como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho h \phi}{J} \right) + \frac{\partial(\rho h \tilde{U} \phi)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\rho h \tilde{V} \phi)}{\partial \eta} = \\ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(h \Gamma^\phi J \alpha \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h \Gamma^\phi J \gamma \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \hat{S}^\phi \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde J é o jacobiano da transformação definido, para o caso bi-dimensional como

$$J = \det \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x \quad (4.3)$$

os parâmetros α , β , e γ são as componentes do tensor métrico covariante, definido como:

$$\begin{aligned} \alpha &= g_{11} = x_\eta^2 + y_\eta^2 \\ \gamma &= g_{22} = x_\xi^2 + y_\xi^2 \\ \beta &= g_{12} = g_{21} = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta \end{aligned} \quad (4.4)$$

e as velocidades \tilde{U} e \tilde{V} são as componentes contravariantes do vetor velocidade sem normalização métrica (Maliska (1995), cap. 12) utilizadas para avaliar os fluxos de massa nas faces do volume de controle. Estas são obtidas, em função das velocidades cartesianas como

$$\begin{aligned} \tilde{U} &= \frac{1}{J} (\xi_x u + \xi_y v) \\ \tilde{V} &= \frac{1}{J} (\eta_x u + \eta_y v) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Ou, em função das métricas da transformação inversa,

$$\begin{aligned} \tilde{U} &= (y_\eta u - x_\eta v) \\ \tilde{V} &= (x_\xi v - y_\xi u) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Observe que as variáveis \tilde{U} e \tilde{V} nos fornecem a vazão volumétrica nas respectivas faces do volume de controle, uma vez que, no domínio computacional, as dimensões do volume de controle são unitárias.

Procedendo da mesma forma, podemos recuperar as equações da conservação da massa e quantidade de movimento em coordenadas generalizadas a partir da equação geral da convecção-difusão (Eq.(4.2)). Neste caso, o termo fonte, deve ser avaliado no novo sistema coordenado, desta forma temos para o gradiente de uma variável ϕ qualquer,

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}_i} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{x}_i} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{x}_i} \right) \quad (4.7)$$

Assim, o gradiente de pressão que é função do gradiente de espessura por tratar-se da pressão hidrostática, fica:

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{x}_i} = \rho g h \left(\Delta \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}_i} + \frac{\partial \zeta}{\partial \mathbf{x}_i} \right) = \frac{\rho g h}{J} \left[\Delta \left(\frac{\partial h}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{x}_i} + \frac{\partial h}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{x}_i} \right) + \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{x}_i} + \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{x}_i} \right] \quad (4.8)$$

Deve-se lembrar que em função da transformação, $\hat{S} = S/J$, por isto aparece o jacobiano da transformação dividindo o gradiente de pressão. Os termos que contem derivadas de ζ representam o gradiente de elevação da superfície d'água. Como estes termos são em geral de menor ordem do que os gradientes de espessura do óleo, não foram considerados no modelo numérico por simplicidade e ainda porque estes dados não são de fácil obtenção. Deve-se deixar claro, entretanto, que o fato de se resolverem as equações de conservação na sua forma original nos permitiria levar em conta estes termos caso eles fossem de importância e os dados fossem disponíveis. As tensões de cisalhamento no topo e fundo da mancha devem ser apenas divididas pelo jacobiano da transformação para se obterem os termos transformados, já que não aparecem derivadas espaciais nesses termos.

Fazendo-se estas transformações, as equações da conservação da massa, quantidade de movimento em x e quantidade de movimento em y são, respectivamente

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho h}{J} \right) + \frac{\partial (\rho h \tilde{U})}{\partial \xi} + \frac{\partial (\rho h \tilde{V})}{\partial \eta} = 0 \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho h u}{J} \right) + \frac{\partial(\rho h \tilde{U} u)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\rho h \tilde{V} u)}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(h \mu J \alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - h \mu J \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h \mu J \gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - h \mu J \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) + \frac{\tau_y^T}{J} - \frac{\tau_y^B}{J} + \\
& - \frac{\rho g h}{J} \left[\Delta \left(\frac{\partial h}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right]
\end{aligned} \tag{4.10}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho h v}{J} \right) + \frac{\partial(\rho h \tilde{U} v)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\rho h \tilde{V} v)}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(h \mu J \alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - h \mu J \beta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h \mu J \gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - h \mu J \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) + \frac{\tau_y^T}{J} - \frac{\tau_y^B}{J} + \\
& - \frac{\rho g h}{J} \left[\Delta \left(\frac{\partial h}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right]
\end{aligned} \tag{4.11}$$

4.2 Discretização das equações pelo método dos volumes finitos

Esta seção tem como propósito descrever como será feita a discretização e resolução das equações apresentadas acima. Primeiramente, será mostrado a discretização da equação geral da convecção-difusão Eq. (4.2), lembrando que a partir desta equação obtém-se as equações da conservação da quantidade de movimento em x e y. A seguir, descrever-se-á o tratamento do acoplamento $h - \vec{V}$ na forma semi-implícita, como proposto por Casulli e Cheng (1992).

4.2.1 Equação da de conservação para um escalar geral ϕ

Integrando a equação geral da convecção-difusão para o plano transformado (Eq.(4.2)), no volume P mostrado na Fig. 4.1, temos

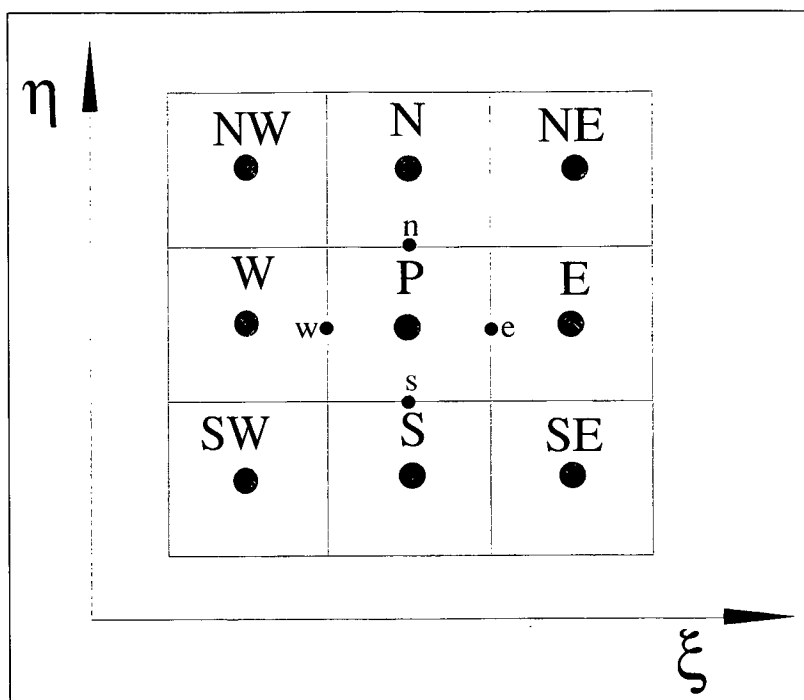


Fig. 4.1: Esquema para a integração num volume de controle no plano transformado.

$$\begin{aligned}
 & \int_t^c \int_w^e \int_s^n \left(\frac{\partial(\rho h \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho h \tilde{U} \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho h \tilde{V} \phi)}{\partial y} \right) d\xi d\eta dt = \\
 & \int_t^c \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h \Gamma^\phi J \alpha \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right] d\xi d\eta dt \quad (4.12) \\
 & \int_t^c \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(h \Gamma^\phi J \gamma \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \right] d\xi d\eta dt + \int_t^c \int_w^e \int_s^n \hat{S}^\phi d\xi d\eta dt
 \end{aligned}$$

A aproximação que se faz aqui é considerar que os fluxos convectivos e difusivos avaliados no meio da face do volume de controle (ponto de integração), representa a média de cada fluxo na face correspondente. Logo, o resultado da integração, é

$$\begin{aligned}
 & \frac{\rho h \phi \Delta V}{J} \Big|_p - \frac{\rho h \phi \Delta V}{J} \Big|_p^0 + \rho h \tilde{U} \phi \Delta \eta \Big|_e - \rho h \tilde{U} \phi \Delta \eta \Big|_w + \rho h \tilde{V} \phi \Delta \xi \Big|_n \\
 & - \rho h \tilde{V} \phi \Delta \xi \Big|_s = h \Gamma^\phi J \alpha \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Delta \eta \Big|_e - h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \Delta \eta \Big|_e - \\
 & h \Gamma^\phi J \alpha \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Delta \eta \Big|_w + h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \Delta \eta \Big|_w + h \Gamma^\phi J \alpha \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \Delta \xi \Big|_n \\
 & - h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Delta \xi \Big|_s - h \Gamma^\phi J \alpha \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \Delta \xi \Big|_s + h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Delta \xi \Big|_s + \\
 & L[\hat{P}^\phi]_p \Delta V + L[\hat{S}^\phi]_p \Delta V
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

onde $\Delta V = \Delta \xi \Delta \eta$ corresponde à área do volume de controle no plano transformado. Observe-se que mesmo que ΔV tenha unidades de área (L^2), o termo $h \Delta V$, que aparece na discretização do termo transiente, tem unidades de volume (L^3), isto por ser modelo tri-dimensional integrado na vertical, e não apenas bi-dimensional.

Para avaliar os fluxos nas faces dos volumes, devemos utilizar uma função de interpolação, tal que, estes fluxos fiquem em função dos valores armazenados nos centros dos volumes. Utilizaremos neste caso a função *WUDS* proposta por Raithby e Torrance (1974). Segundo esta função, o valor de ϕ e sua respectiva derivada, para uma face do volume (neste caso a face leste, para exemplificar) são dados por

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e \right) \phi_E + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \phi_P \tag{4.14}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Big|_e = \bar{\beta}_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi} \right) \tag{4.15}$$

Os parâmetros $\bar{\alpha}_e$ e $\bar{\beta}_e$ são os coeficientes de ponderação e seu valor é função de razão entre o fluxos convectivo e difusivo numa direção coordenada, r . As equações para estes parâmetros são

$$\bar{\alpha}_e = \frac{r^2}{10 + 2r^2} \frac{r}{|r|} \tag{4.16}$$

$$\bar{\beta}_e = \frac{1 + 0.005r^2}{1 + 0.05r^2} \quad (4.17)$$

Quando coordenadas não ortogonais são consideradas, como neste trabalho, deve-se dispor das derivadas cruzadas nos pontos de integração. Neste caso a aproximação é feita utilizando-se derivadas centrais (Maliska e Raithby, 1984),

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_e = \left(\frac{\phi_{NE} + \phi_N - \phi_{SE} - \phi_S}{4\Delta\eta} \right) \quad (4.18)$$

Analogamente, podem ser obtidos os fluxos para as faces restantes do volume⁶. Substituindo os fluxos na equação da convecção-difusão integrada no volume de controle (Eq. (4.13)), obtemos a equação geral discretizada como:

$$\begin{aligned} \frac{M_P}{\Delta t} \phi_P + A_P \phi_P^0 &= A_e \phi_E^0 + A_w \phi_W^0 + A_n \phi_N^0 + A_s \phi_S^0 + \\ &+ A_{ne} \phi_{NE}^0 + A_{se} \phi_{SE}^0 + A_{nw} \phi_{NW}^0 + A_{sw} \phi_{SW}^0 + \frac{M_P^0}{\Delta t} \phi_P^0 + \hat{S} \Delta V \end{aligned} \quad (4.19)$$

Os superescritos “0”, indicam valores avaliados no intervalo temporal anterior. Como ϕ representa as velocidades, vemos que elas serão avaliadas explicitamente. Desta forma não é necessário atualizar os coeficientes dentro de um passo temporal, uma vez que o produto do tipo $A_P \phi_P^0$ é calculado todo no mesmo nível temporal, pois, os coeficientes A_i são função de ϕ nas equações do movimento.

Os coeficientes da Eq. (4.19), são avaliados como:

$$\begin{aligned} A_P &= A_e + A_w + A_n + A_s + A_{ne} + A_{nw} + A_{se} + A_{sw} - \frac{M_P}{\Delta t} + \frac{M_P^0}{\Delta t} \\ A_e &= -\dot{M}_e \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) + \frac{D_{11e} \bar{\beta}_e}{\Delta \xi} + \frac{(D_{21n} - D_{21s})}{4\Delta \xi} \end{aligned} \quad (4.20)$$

⁶ A descrição detalhada da obtenção das equações discretizadas é dada em Maliska (1995) Cap. 15

$$A_w = \dot{M}_w \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) + \frac{D_{11w} \bar{\beta}_w}{\Delta \xi} + \frac{(D_{21n} - D_{21s})}{4\Delta \xi}$$

$$A_n = -\dot{M}_n \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) + \frac{D_{22n} \bar{\beta}_n}{\Delta \eta} + \frac{(D_{12e} - D_{12w})}{4\Delta \eta}$$

$$A_s = \dot{M}_s \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) + \frac{D_{22s} \bar{\beta}_s}{\Delta \eta} + \frac{(D_{12e} - D_{12w})}{4\Delta \eta}$$

$$A_{ne} = \frac{D_{12e}}{4\Delta \eta} + \frac{D_{21n}}{4\Delta \xi}$$

$$A_{nw} = -\frac{D_{12w}}{4\Delta \eta} - \frac{D_{21n}}{4\Delta \xi}$$

$$A_{se} = -\frac{D_{12e}}{4\Delta \eta} - \frac{D_{21s}}{4\Delta \xi}$$

$$A_{sw} = \frac{D_{12w}}{4\Delta \eta} + \frac{D_{21s}}{4\Delta \xi}$$

onde as vazões mássicas nas faces dos volumes podem ser calculadas como,

$$\begin{aligned} \dot{M}_e &= (\rho \tilde{U} h)_e \Delta \eta \\ \dot{M}_w &= (\rho \tilde{U} h)_w \Delta \eta \\ \dot{M}_n &= (\rho \tilde{V} h)_n \Delta \xi \\ \dot{M}_s &= (\rho \tilde{V} h)_s \Delta \xi \end{aligned} \quad (4.21)$$

e as difusividades são dadas por,

$$\begin{aligned} D_{11} &= \Gamma^\phi J \alpha h \Delta \eta \\ D_{12} &= \Gamma^\phi J \beta h \Delta \eta \\ D_{22} &= \Gamma^\phi J \gamma h \Delta \xi \\ D_{21} &= \Gamma^\phi J \beta h \Delta \xi \end{aligned} \quad (4.22)$$

Finalmente, a Eq. (4.19) pode ser escrita em forma mais compacta como:

$$\frac{M_p \phi_p}{\Delta t} = \phi_p^0 \left(\frac{M_p^0}{\Delta t} - A_p \right) + \sum A_{nb} \phi_{NB}^0 + \hat{S} \Delta V \quad (4.23)$$

Assim, podemos definir um Operador Convectivo-Difusivo Explícito Não Linear em Volumes Finitos de ϕ , isto é, um operador que aplicado à variável ϕ , retorne o valor do balanço convectivo-difusivo dessa variável, num volume de controle. Este conceito é introduzido no trabalho de Casulli e Cheng (1992), mas naquele trabalho o operador é em diferenças finitas e coordenadas cartesianas⁷.

No presente trabalho, este operador é definido como:

$$F[\phi_p] = \frac{\Delta t}{M_p} \left[\phi_p^0 \left(\frac{M_p^0}{\Delta t} - A_p \right) + \sum A_{nb} \phi_{NB}^0 + \hat{S} \Delta V \right] \quad (4.24)$$

Observe que, pelo fato de utilizar-se um armazenamento co-localizado das variáveis, não se dispõe das componentes contravariantes da velocidade nas faces dos volumes que aparecem nas Eqs. (4.21). Logo estas velocidades serão avaliadas a partir de uma média aritmética entre as componentes cartesianas do vetor velocidade e utilizando as Eqs. (4.6). Esta média será apenas utilizada para avaliar os coeficientes nas equações do movimento. Quando estas velocidades aparecem na equação da conservação da massa outros cuidados deverão ser tomados, os quais serão descritos na próxima seção.

4.2.1.1 Tratamento do termo fonte

Como foi visto, a tensão cisalhante exercida pela água sobre a mancha de óleo é função da velocidade relativa entre o óleo e a água, ou seja, é função da própria velocidade do óleo. Rigorosamente, a tensão exercida pelo vento também deveria ser função da velocidade relativa entre o vento e o óleo, mas neste caso a velocidade do óleo é muito menor que a velocidade do vento e, portanto, a tensão cisalhante no topo da mancha será apenas considerada como função da velocidade do vento.

⁷ Nesse Trabalho é dado o nome de "Operador Explícito Convectivo – Difusivo em Diferenças Finitas"

Devido a dependência entre a tensão cisalhante no fundo da mancha e a velocidade do óleo, o termo fonte deve ser avaliado o mais implicitamente possível para conferir estabilidade ao algoritmo. Isto é, em lugar de avaliar o termo fonte a partir dos valores disponíveis da velocidade do passo temporal anterior, este é avaliado como função linear da velocidade, que por sua vez varia com o tempo, ou seja,

$$S(\mathbf{u}) = S_p(\mathbf{u}(t)) + S_c \quad (4.25)$$

Como sugerido por Patankar (1980), esta linearização pode ser feita expandindo-se o termo fonte em serie de Taylor. Como neste caso existe uma dependência linear entre a tensão e a velocidade do óleo, o termo fonte pode ser linearizado por inspeção visual, tomando S_p igual ao fator que multiplica a velocidade e igualando S_c com os termos restantes. Para representar as tensões dadas pelas equações (Eqs. (3.32) e (3.33)), a linearização do termo fonte para as equações da conservação da quantidade de movimento em x e y , é dada por

$$S_i(\mathbf{u}_i) = -C_f^{água} \mathbf{u}_i + C_f^{vento} \left| \vec{V}^{vento} \right| \mathbf{V}_i^{vento} + C_f^{agua} \mathbf{V}_i^{água} \quad (4.26)$$

ou seja,

$$S_p^{u,v} = -C_f^{água} \quad (4.27)$$

e

$$\begin{aligned} S_c^u &= C_f^{vento} \left| \vec{V}^{vento} \right| u^{vento} + C_f^{agua} u^{água} \\ S_c^v &= C_f^{vento} \left| \vec{V}^{vento} \right| v^{vento} + C_f^{agua} v^{água} \end{aligned} \quad (4.28)$$

Esta linearização do termo fonte é válida para as tensões no topo e fundo da mancha avaliadas através das equações (Eqs. (3.32) e (3.33)), porém, como já foi mencionado, qualquer outra expressão pode ser usada para avaliar estas tensões. Veremos no capítulo seguinte que para o caso do espalhamento em águas calmas, a tensão será avaliada como função do tempo, logo S_p será função do tempo.

Analisando o termo fonte, fazemos menção novamente à similaridade das equações sendo resolvidas aqui com as que governam os escoamentos em águas rasas. É comum nesses modelos avaliar a tensão de corte exercida pelo fundo do mar ou rio, como sendo proporcional à velocidade da água utilizando-se a conhecida formula de Chezi (Chow, 1973), dada por

$$\tau_i^B = \frac{\rho g}{C^2} |\vec{V}| u_i \quad (4.29)$$

Esta tensão é geralmente avaliada em forma implícita, inclusive em formulações explícitas para as equações da quantidade de movimento como feito por Casulli e Cheng (1992). Observe que, para o caso de Águas Rasas, S_p é ainda função da velocidade, o que aconteceria no caso sendo tratado aqui, se for utilizada uma equação não linear para relacionar a tensão com a velocidade como feito por Hess e Kerr (1979).

Se pensarmos em uma mancha de óleo derramada em águas totalmente calmas, ou seja $\vec{V}^{água} = 0$, e apenas o vento exercendo uma tensão no topo da mancha, o problema seria igual ao de águas rasas, ou seja a forma de avaliar a tensão exercida pela água, mesmo esta estando calma, faz com que apareça um atrito sobre a mancha tendendo a retê-la. Neste caso, o efeito da água sobre a mancha é análogo ao efeito do fundo do mar sobre o corpo de água, no caso dos modelos de Águas Rasas.

4.2.2 Tratamento do acoplamento $h-\vec{V}$

Na literatura numérica, este tratamento é comumente chamado de **tratamento do acoplamento pressão-velocidade**. Neste caso, por estarmos considerando apenas a pressão hidrostática, esta é uma função linear de h (Eq. (3.29)), e os métodos tradicionalmente utilizados para este acoplamento como SIMPLE (Patankar, 1972) ou PRIME (Maliska, 1981) entre outros, podem ser aplicados para o presente problema.

Com já foi comentado, no presente trabalho, utilizaremos o método semi-implícito proposto por Casulli e Cheng (1992). Os métodos mencionados acima, podem

ser qualificados como métodos preditivo-corretivos, onde a equação da massa é usada para avaliar a pressão, ou correções da mesma como é o caso do SIMPLE, e as velocidades são também corrigidas no mesmo intervalo temporal. Quando nesses métodos quer-se captar o transiente real, deve-se iterar no mesmo intervalo temporal até convergência e então avançar no tempo. Também no método PRIME, em que as velocidades são avaliadas explicitamente, estas são corrigidas dentro do intervalo temporal utilizando as últimas pressões calculadas.

O método semi-implícito que será aqui utilizado é similar ao PRIME no sentido que as velocidades são avaliadas explicitamente mas neste caso não são atualizadas dentro do mesmo intervalo temporal, ou seja logo após o cálculo da pressão, se avança no tempo e se calculam as velocidades no novo intervalo temporal. A seqüência de cálculo será descrita em detalhe, logo mais.

Similarmente à maioria dos métodos de tratamento do acoplamento pressão-velocidade, o objetivo é obter uma equação para a pressão a partir da equação da conservação de massa. Isto pode ser visto fisicamente como que as pressões (espessuras da lamina de óleo) calculadas através da equação da massa, quando substituídas nas equações da quantidade de movimento geram velocidades tais que satisfaçam a conservação da massa. Para se obter uma equação para avaliar a espessura a partir da equação da massa, serão utilizadas as equações da quantidade de movimento avaliando a convecção-difusão de quantidade de movimento em forma explícita e o gradiente de pressão em forma implícita. Assim, para o volume P da Fig. 4.1, temos

$$u_p = F[u]_p^0 - \frac{\rho \Delta t g \Delta h}{M_p} \left[\left. \frac{\xi_x}{J} \right|_P \frac{(h_E - h_W)}{2\Delta\xi} + \left. \frac{\eta_x}{J} \right|_P \frac{(h_N - h_S)}{2\Delta\eta} \right] \quad (4.30)$$

$$v_p = F[v]_p^0 - \frac{\rho \Delta t g \Delta h}{M_p} \left[\left. \frac{\xi_y}{J} \right|_P \frac{(h_N - h_S)}{2\Delta\eta} + \left. \frac{\eta_y}{J} \right|_P \frac{(h_E - h_W)}{2\Delta\xi} \right] \quad (4.31)$$

Estas equações representam a discretização **semi-implícita** das Eqs. (4.10) e (4.11), desprezando, como já comentado, os termos que representam os gradientes de elevação d'água. Novamente, o superescrito "0" indica que a variável esta sendo

avaliada no instante temporal anterior. Quando nenhum superescrito for colocado indicará, sempre, que a variável esta sendo avaliada no intervalo temporal atual, isto é, implicitamente.

A equação da conservação da massa (Eq. (4.9)) integrada no volume P da Fig. 4.1, é

$$h_p = h_p^0 - \rho J_P \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left[(h^0 \tilde{U}|_e - h^0 \tilde{U}|_w) \right] - \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left[(h^0 \tilde{V}|_n - h^0 \tilde{V}|_s) \right] \quad (4.32)$$

Vemos que para avaliar os fluxos de massa nas faces do volume se faz uso das velocidades contravariantes sem normalização métrica nessas faces. As velocidades cartesianas dadas pelas Eqs. (4.30) e (4.31) avaliadas na face e são

$$u_e = F[u]_e^0 - \frac{\rho \Delta t g \Delta h_e}{M_e} \left[\frac{\xi_x}{J} \Big|_e \frac{(h_E - h_P)}{\Delta \xi} + \frac{\eta_x}{J} \Big|_e \frac{(h_{NE} + h_N - h_{SE} - h_S)}{4 \Delta \eta} \right] \quad (4.33)$$

$$v_e = F[v]_e^0 - \frac{\rho \Delta t g \Delta h_e}{M_e} \left[\frac{\xi_y}{J} \Big|_e \frac{(h_E - h_P)}{\Delta \xi} + \frac{\eta_y}{J} \Big|_e \frac{(h_{NE} + h_N - h_{SE} - h_S)}{4 \Delta \eta} \right] \quad (4.34)$$

Substituindo estas velocidades na expressão para a velocidade contravariante (Eq.(4.5)) e operando algebricamente, temos:

$$\tilde{U}_e = y_\eta F[u]_e - x_\eta F[v]_e - \frac{\rho \Delta t g J \Delta h_e}{M_e} \left[\alpha_e \frac{(h_E - h_P)}{\Delta \xi} - \beta_e \frac{(h_N + h_{NE} - h_S - h_{SE})}{4 \Delta \eta} \right] \quad (4.35)$$

onde os parâmetros α_e e β_e são as componentes do tensor métrico contravariante mostradas na Eq. (4.4). Definindo,

$$\tilde{U}_e^* = y_\eta F[u]_e - x_\eta F[v]_e \quad (4.36)$$

apenas por simplicidade algébrica, a expressão para a velocidade contravariante na face do volume, fica:

$$\tilde{U}_e = \tilde{U}_e^* - \frac{\rho \Delta t g J \Delta h_e}{M_e} \left[\alpha_e \frac{(h_E - h_P)}{\Delta \xi} - \beta_e \frac{(h_N + h_{NE} - h_S - h_{SE})}{4 \Delta \eta} \right] \quad (4.37)$$

Analogamente podem ser obtidas as expressões para as velocidades contravariantes nas outras faces do volume como,

$$\tilde{U}_w = \tilde{U}_w^* - \frac{\rho \Delta t g J \Delta h_w}{M_w} \left[\alpha_w \frac{(h_p - h_w)}{\Delta \xi} - \beta_w \frac{(h_N + h_{NW} - h_S - h_{SW})}{4 \Delta \eta} \right] \quad (4.38)$$

$$\tilde{V}_n = \tilde{V}_n^* - \frac{\rho \Delta t g J \Delta h_n}{M_n} \left[\gamma_n \frac{(h_N - h_p)}{\Delta \xi} - \beta_n \frac{(h_E + h_{NE} - h_W - h_{NW})}{4 \Delta \eta} \right] \quad (4.39)$$

$$\tilde{V}_s = \tilde{V}_s^* - \frac{\rho \Delta t g J \Delta h_s}{M_s} \left[\gamma_s \frac{(h_p - h_S)}{\Delta \xi} - \beta_s \frac{(h_E + h_{SE} - h_W - h_{SW})}{4 \Delta \eta} \right] \quad (4.40)$$

Deve-se deixar claro que, embora as equações acima pareçam-se com as equações de correção de métodos tipo preditivo-corretivos como SIMPLE, estas representam as equações da conservação da quantidade de movimento na forma completa e não apenas uma correção para a velocidade, já que os termos \tilde{U}_e^* , \tilde{U}_w^* , \tilde{V}_n^* e \tilde{V}_s^* representam as equações completas do movimento em forma explícita (excluindo o gradiente de pressão) e não apenas a velocidade avaliada no tempo anterior como naqueles métodos de acoplamento. Os termos convectivos e difusivos nestas equações são avaliados explicitamente e o termo de pressão em forma implícita. Aqui, as massas M_e , M_w , M_n e M_s , correspondem às massas dos pseudo-volumes localizados nas faces dos volumes de controle, como se o arranjo fosse desencontrado, ou seja, seriam as massas dos volumes de controle utilizados para se fazer os balanços de quantidade de movimento em um arranjo desencontrado. Aqui, essas massas são avaliadas como

$$\begin{aligned} M_e &= \frac{\rho h \Delta \xi \Delta \eta}{J} \Big|_e \\ M_w &= \frac{\rho h \Delta \xi \Delta \eta}{J} \Big|_w \\ M_n &= \frac{\rho h \Delta \xi \Delta \eta}{J} \Big|_n \\ M_s &= \frac{\rho h \Delta \xi \Delta \eta}{J} \Big|_s \end{aligned} \quad (4.41)$$

Substituindo as expressões para as velocidades contravariantes nas faces do volume, na equação da conservação da massa (Eq. (4.32)) e re-arranjando termos, obtemos uma equação para a espessura da camada de óleo como

$$A_p h_p = A_e h_e + A_w h_w + A_n h_n + A_s h_s + \\ + A_{ne} h_{NE} + A_{se} h_{SE} + A_{nw} h_{NW} + A_{sw} h_{SW} + B \quad (4.42)$$

onde

$$A_p = 1 + \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \alpha \Big|_e + \frac{h^2}{M} \alpha \Big|_w}{\Delta \xi} + \frac{\frac{h^2}{M} \alpha \Big|_n + \frac{h^2}{M} \alpha \Big|_s}{\Delta \eta} \right)$$

$$A_e = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \alpha \Big|_e - \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_n + \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_s}{\Delta \xi} \right)$$

$$A_w = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \alpha \Big|_w + \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_n - \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_s}{\Delta \xi} \right) \quad (4.43)$$

$$A_n = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \gamma \Big|_n - \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_e + \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_w}{\Delta \eta} \right)$$

$$A_s = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \gamma \Big|_s + \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_e - \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_w}{\Delta \eta} \right)$$

$$A_{ne} = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(-\frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_e}{4\Delta\eta} - \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_n}{4\Delta\xi} \right)$$

$$A_{nw} = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_w}{4\Delta\eta} + \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_n}{4\Delta\xi} \right)$$

$$A_{se} = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_e}{4\Delta\eta} + \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_s}{4\Delta\xi} \right)$$

$$A_{sw} = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(-\frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_w}{4\Delta\eta} - \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_s}{4\Delta\xi} \right)$$

$$B = h_p^0 - \Delta t J_p (h_e^0 \tilde{U}_e^* - h_w^0 \tilde{U}_w^* + h_n^0 \tilde{V}_n^* - h_s^0 \tilde{V}_s^*)$$

Observe que na Eq. (4.35) é necessário dispor do valor do operador convectivo-difusivo nas faces do volume de controle. Pelo fato das componentes cartesianas das velocidades serem armazenadas no centro dos volumes de controle (arranjo co-localizado) e o operador convectivo-difusivo ser calculado a partir destas velocidades, estes valores não estão disponíveis e devem ser calculados a partir dos valores armazenados nos centros dos volumes. É amplamente conhecido na literatura que utilizar uma interpolação linear ou então as mesmas funções de interpolação utilizadas comumente na discretização das equações (UDS, CDS, WUDS, etc.) para avaliar as velocidades nas faces, cria um acoplamento fraco entre a pressão (espessura) e a velocidade dificultando grandemente a convergência (Marchi e Maliska, 1994). A sugestão proposta no trabalho citado é avaliar as velocidades cartesianas nas fronteiras a partir de uma média das equações da quantidade de

movimento e a partir destas calcular as componentes contravariantes que entram na equação da conservação da massa.

Seguindo este raciocínio, este trabalho, se propõe avaliar o operador convectivo-difusivo nas faces do volume da seguinte forma

$$F[\mathbf{u}_i]_c = \frac{F[\mathbf{u}_i]_E + F[\mathbf{u}_i]_P}{2} \quad (4.44)$$

e, similarmente, para as outras faces. Lembrando que $F[\mathbf{u}_i]_P$ representa a equação explícita para a quantidade de movimento, sem o gradiente de pressão, a interpolação mostrada na Eq. (4.44) representa de fato a média das equações, da quantidade de movimento, tal como sugerido por Marchi e Maliska (1994).

Observa-se ainda que, tanto nas equações do movimento quanto na equação da massa, deve-se dispor dos valores de h nas faces do volume. Estas espessuras foram avaliadas utilizando-se uma interpolação tipo *UPWIND* e a razão será explicada logo mais. A seguir, explicaremos como é avaliada a posição da mancha em cada intervalo temporal.

4.2.2.1 Definição da posição da mancha de petróleo

A rigor, o problema sendo aqui tratado, deveria ser resolvido através de um método de seguimento de interface no qual a posição da interface óleo-água-ar seja resultado do problema. Como não será utilizado um método de seguimento de interface, já que o aumento na complexidade não é compensado pelo aumento de acurácia, deverá ser adotada, neste trabalho, uma convenção para definir os limites da mancha. Deve-se esclarecer que, em geral, os modelos Eulerianos não realizam o seguimento da interface, e os limites da mancha são definidos geralmente a partir de uma espessura determinada. Este valor é geralmente tomado como um micrômetro e é o valor que será considerado neste trabalho.

4.2.2.2 Avaliação das espessuras nas faces dos volumes

Esta seção será dedicada para explicar como se avaliaram as espessuras nas faces dos volumes, já que quando se faz o balanço de massa num volume, os fluxos

nessas faces são avaliados a partir destas espessuras e , portanto, a forma de avaliá-las é de grande influência na consistência do algoritmo.

A proposta de Casulli e Cheng (1992) para avaliar as espessuras é tomar o valor na face entre dois volumes como o máximo dos valores armazenados nos centros dos volumes contíguos, somado com a batimetria (lembramos que nesse trabalho o método é apresentado para a solução das equações de Águas Rasas) que é armazenada na face do volume.

Suponhamos agora um problema onde a mancha seja arrastada por uma corrente de água e analisemos a interface entre os primeiros volumes ocupados pela mancha (segundo a definição acima) a montante e os volumes não contaminados. A Fig. 4.2 mostra esta interface.

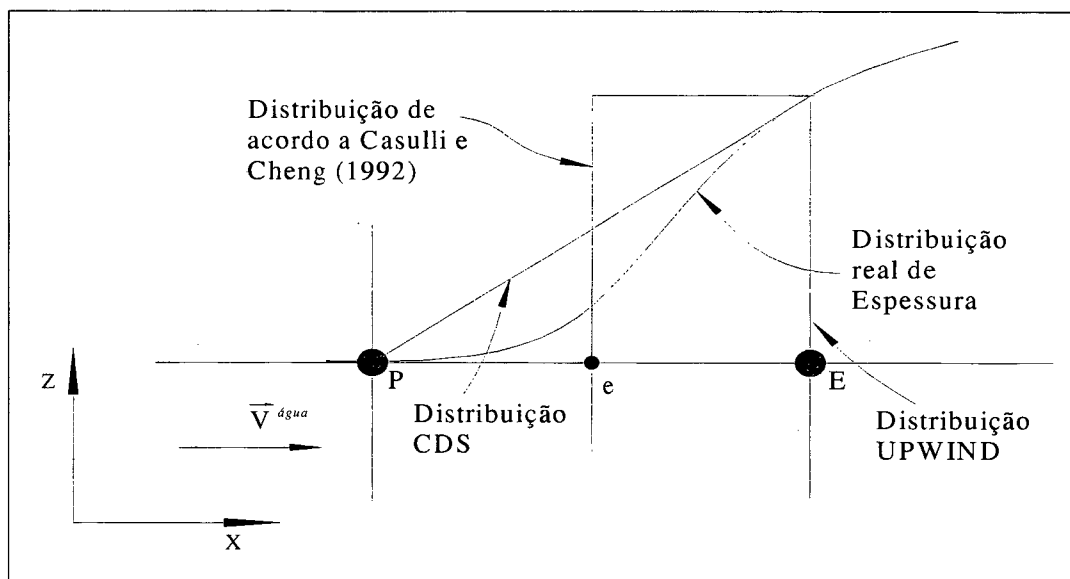


Fig. 4.2: Esquema mostrando a distribuição de espessura nos primeiros volumes ocupados pela mancha a montante.

Suponhamos ainda que o valor de espessura armazenado em P é zero (1×10^{-15} é o valor de inicialização já que h não pode ser nulo). Se o valor de espessura na face e do volume for diferente de zero, quando for feito o balanço de massa teremos massa saindo de um volume cuja massa é zero, já que a massa de óleo presente no volume é calculada a partir do valor armazenado em P . Isto resulta em valores de espessura negativos em P o que é fisicamente inconsistente e ainda causa instabilidades que levam à divergência. Como observamos na Fig. 4.2, a avaliação da espessura na

interface através de uma média aritmética (esquema CDS) ou o esquema proposto por Casulli e Cheng (1992), nos leva a ter um valor diferente de zero na face do volume onde a espessura armazenada para esse volume é zero. Assim a proposta neste trabalho é avaliar as espessuras através de uma interpolação UPWIND, de forma a assegurar um fluxo de massa nulo na fronteira para os volumes em que as espessuras armazenadas nos centros dos mesmos, seja nula.

4.2.3 Condições de contorno

Em modelos de trajetória são geralmente aplicadas dois tipos de condições de contorno; um para as fronteiras do domínio de solução que limitam com as costas e outro para aquelas que apenas restringem o domínio de cálculo em mar aberto. Neste ultimo caso não existe uma fronteira física que limite o domínio e a localização destas fronteiras deve ser escolhida, dentro das possibilidades, de forma que a mancha de óleo fique sempre dentro do domínio de cálculo. Como é, em geral, difícil de estimar a posição final da mancha (esse é justamente o objetivo deste trabalho), serão utilizadas condições **localmente parabólicas** nestas fronteiras, ou seja se procura fazer com que a localização da fronteira não influa na posição da porção da mancha remanescente dentro do domínio de cálculo.

Para o caso de fronteira que limitam com as costas, diferentes enfoques são comumente utilizados. A condição mais simples, que é a que será utilizada neste trabalho, é supor esta fronteira impermeável, deixando a espessura variar livremente nessas fronteiras. Existem outras propostas para esta condição de contorno como a utilizada por Cuesta *et alii* (1990), onde é avaliada a dispersão do óleo sobre a costa em função da velocidade e o gradiente de espessura normal à fronteira. Outra condição normalmente utilizada, descrita por Shen e Yapa (1988), baseada na **vulnerabilidade** das costas que são atingidas pela mancha de óleo, que é um parâmetro que reflete a capacidade de reter óleo dos diferentes tipos de costas atingidas. Esta capacidade de retenção de óleo vai diminuindo a medida que maior quantidade de óleo atinge a costa. Este fenômeno já foi descrito no capítulo 2. Logo, para aplicar este tipo de condição de contorno, a capacidade de reter óleo dos diferentes tipos de costas é caracterizada a partir da vida média das mesmas. Este parâmetro descreve a taxa de rejeição de óleo de uma costa a partir do momento que

a mancha atingiu a mesma. No momento em que o óleo atingiu pela primeira vez a costa, todo ele é retido. A porcentagem de massa retida vai diminuindo com o tempo até que todo o óleo é rejeitado pela costa.

A condição a ser utilizada neste trabalho que é de impermeabilidade, um caso particular da descrita acima no sentido que, considerar a costa impermeável é como se se tratasse de uma costa com vida média zero. Colocar a condição de contorno descrita acima traria grandes complicações do ponto de vista numérico (no trabalho de Shen e Yapa é utilizado um modelo Lagrangeano, e daí a maior facilidade para aplicar este tipo de condição de contorno). Os fenômenos localizados que acontecem nas regiões costeiras como arrebentação de ondas, presença de partículas sólidas em suspensão, formação de canais litorâneos⁸, etc. são de tal complexidade que não se melhorariam muito os resultados alterando apenas as condições de contorno. Para melhorar realmente a acurácia do modelo, se deveria considerar estes fenômenos ou utilizar modelos que considerem exclusivamente esta região, como feito por Borthwick e Joynes (1992).

A seguir descreveremos a aplicação das condições de contorno para uma fronteira (leste no caso, Fig. 4.3), sendo a aplicação nas restantes fronteiras análoga. Como comentado acima, no presente trabalho utilizaremos condições de contorno de fronteira impermeável quando se tratar de uma costa e condições localmente parabólicas quando a fronteira estiver em mar aberto.

⁸ A incidência não perpendicular das ondas sobre a costa gera correntes paralelas à costa, em alguns casos muito fortes. Isto causa uma forte distorção localizada do campo de velocidades d'água na região costeira.

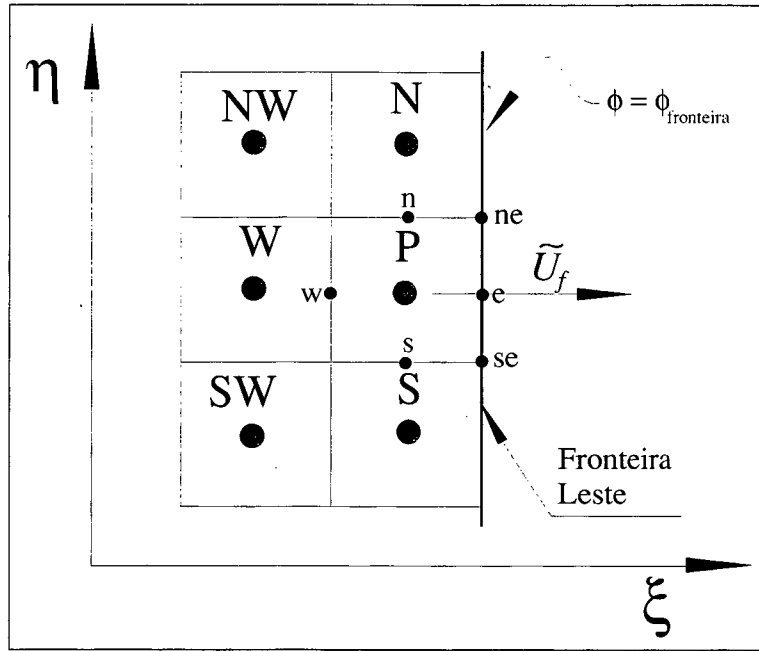


Fig. 4.3: Esquema mostrando a fronteira leste no domínio computacional.

Para o caso de fronteira impermeável temos, para a equação de convecção-difusão, que os fluxos convectivos são nulos, enquanto os fluxos difusivos para a face e são dados por:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_e = \frac{2(\phi_f - \phi_P)}{\Delta \xi} \quad (4.45)$$

e

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_e = \frac{(\phi_{ne} - \phi_{se})}{\Delta \xi} \quad (4.46)$$

Em virtude das derivadas cruzadas nas faces n e s serem também avaliadas a partir dos valores de ϕ_{NE} e ϕ_{SE} , estas deverão agora ser avaliadas como

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{\left(\phi_{ne} - \frac{(\phi_N + \phi_{NW} + \phi_W + \phi_P)}{4} \right)}{\Delta \xi} \quad (4.47)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_s = \frac{\left(\phi_{se} - \frac{(\phi_w + \phi_p + \phi_{sw} + \phi_s)}{4} \right)}{\Delta \xi} \quad (4.48)$$

Note que em um sistema cartesiano, onde não aparecem as derivadas cruzadas, apenas são modificadas as equações para os fluxos da face do volume localizada sobre a fronteira. Note ainda que a condição descrita aqui, é deduzida para um valor qualquer de ϕ_f . No caso sendo tratado aqui ϕ representa as componentes cartesianas do vetor velocidade, e como as condições para as velocidades nestas fronteiras serão de fronteira impermeável, ou seja, ambas componentes nulas, ϕ_f será sempre nulo. Mesmo assim, as condições para os volumes das fronteiras serão deduzidas e implementadas para um valor genérico de ϕ_f para logo particularizar para ϕ_f nulo.

Substituindo as Eqs. (4.45), (4.46), (4.47) e (4.48) na Eq.(4.13), obtemos a equação para o volume P como

$$\begin{aligned} \frac{M_P}{\Delta t} \phi_P + A_P \phi_P^0 &= A_w \phi_w^0 + A_n \phi_n^0 + A_s \phi_s^0 + \\ &+ A_{nw} \phi_{nw}^0 + A_{sw} \phi_{sw}^0 + \frac{M_P^0}{\Delta t} \phi_P^0 + \hat{S} \Delta V \end{aligned} \quad (4.49)$$

Novamente os superíndices “0” indicam que a variável esta sendo avaliada no intervalo temporal anterior. Os coeficientes da equação acima são avaliados como

$$\begin{aligned} A_p &= A_w + A_n + A_s + A_{nw} + A_{sw} - \frac{M_P}{\Delta t} + \frac{M_P^0}{\Delta t} - M_e + \frac{2\bar{\beta}_e D_{11e}}{\Delta \xi} + \\ &\frac{D_{21n} - D_{21s}}{4\Delta \xi} \\ A_w &= \dot{M}_w \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) + \frac{D_{11w} \bar{\beta}_w}{\Delta \xi} + \frac{(D_{21n} - D_{21s})}{2\Delta \xi} \\ A_n &= -\dot{M}_n \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) + \frac{D_{22n} \bar{\beta}_n}{\Delta \eta} + \frac{(D_{12e} - D_{12w})}{4\Delta \eta} - \frac{D_{21n}}{4\Delta \xi} \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$A_s = \dot{M}_s \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) + \frac{D_{22s} \bar{\beta}_s}{\Delta \eta} + \frac{(D_{12e} - D_{12w})}{4\Delta \eta} + \frac{D_{21s}}{4\Delta \xi}$$

$$A_{nw} = -\frac{D_{12w}}{4\Delta \eta} - \frac{D_{21n}}{2\Delta \xi}$$

$$A_{sw} = \frac{D_{12w}}{4\Delta \eta} + \frac{D_{21s}}{2\Delta \xi}$$

O termo fonte dos volumes de fronteira sofre modificações já que este inclui o próprio termo fonte da equação governante e os termos que se acrescentam por causa da influência da condição de contorno. Para um volume que não se encontra sobre a fronteira, expressaremos em geral o termo fonte através da Eq. (4.25) logo, para o volume P da fronteira mostrado na Fig. 4.3, o termo fonte é

$$B = S_p(\mathbf{u}(t)) + S_c + M_e \phi_f + \frac{2\phi_f D_{11e}}{\Delta \xi} + \frac{2\phi_{ne} D_{12e}}{2\Delta \eta} - \frac{\phi_{se} D_{12e}}{2\Delta \eta} + \frac{(\phi_{ne} + \phi_f) D_{21n}}{2\Delta \xi} - \frac{(\phi_{se} + \phi_f) D_{21s}}{2\Delta \xi} \quad (4.51)$$

Os dois últimos termos aparecem por causa da influência dos volumes norte e sul na avaliação dos fluxos na fronteira. Lembrando que ϕ representa em geral uma componente do vetor velocidade e que para fronteira impermeável tem-se condição de não deslizamento, temos que $\phi_f = \phi_{ne} = \phi_{se} = 0$. Logo, o termo fonte dos volumes de fronteira ficará igual aos dos volumes do centro do domínio quando se trate de uma fronteira impermeável.

A condição de contorno, na equação da conservação da massa, será imposta de acordo à sugestão de Maliska (1995) que consiste em realizar o balanço de massa nos volumes de fronteira antes de serem substituídas as equações do movimento na equação da conservação da massa.

Fazendo um balanço de massa no volume P da Fig. 4.3, temos

$$h_p = h_p^0 - \rho J_p \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left[\left(h_p^0 \tilde{U} \Big|_f - h^0 \tilde{U} \Big|_w \right) \right] - \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left[\left(h^0 \tilde{V} \Big|_n - h^0 \tilde{V} \Big|_s \right) \right] \quad (4.52)$$

Esta equação é idêntica à Eq. (4.32), mas em lugar de \tilde{U}_e aparece a velocidade contravariante na fronteira \tilde{U}_f . Esta velocidade é especificada na fronteira, de valor conhecido e fará parte do termo fonte da equação para h . Observe que a espessura na face leste é feita igual ao valor desta no centro do volume, isto porque é o valor mais próximo, já que não são armazenadas as espessuras nas faces dos volumes. Mesmo assim isto é consistente com a avaliação *UPWIND* da variável h , já que não tendo entrada de massa de óleo através das fronteiras, as velocidades serão nulas ou eventualmente saindo do domínio, no caso de fronteira com saída de massa. Logo, a espessura na face leste será sempre igual à espessura em P .

Substituindo as expressões para as velocidades nas faces dos volumes, deixando a velocidade \tilde{U}_f como um valor constante conhecido, temos a equação para a espessura h , no volume P da fronteira, dada por

$$A_p h_p = A_w h_w + A_n h_n + A_s h_s + A_{nw} h_{NW} + A_{sw} h_{SW} + B \quad (4.53)$$

onde os coeficientes e o termo fonte desta equação são dados por:

$$A_p = 1 + \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \alpha \Big|_e + \frac{h^2}{M} \alpha \Big|_w}{\Delta \xi} + \frac{\frac{h^2}{M} \alpha \Big|_n + \frac{h^2}{M} \alpha \Big|_s}{\Delta \eta} + \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_s}{2\Delta \xi} - \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_s}{2\Delta \xi} \right)$$

$$A_w = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \alpha \Big|_w + \frac{h^2}{2M} \beta \Big|_n + \frac{h^2}{2M} \beta \Big|_s}{\Delta \xi} \right) \quad (4.54)$$

$$A_n = \rho \Delta t^2 g \Delta J_p \left(\frac{\frac{h^2}{M} \gamma \Big|_n - \frac{h^2}{2M} \beta \Big|_n + \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_w}{\Delta \eta} \right)$$

$$A_s = \rho \Delta t^2 g \Delta J_P \left(\frac{\frac{h^2}{M} \gamma \Big|_s + \frac{h^2}{2M} \beta \Big|_s - \frac{h^2}{4M} \beta \Big|_w}{\Delta \eta} \right)$$

$$A_{nw} = \rho \Delta t^2 g \Delta J_P \left(\frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_w}{4\Delta \eta} + \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_n}{2\Delta \xi} \right)$$

$$A_{sw} = \rho \Delta t^2 g \Delta J_P \left(-\frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_w}{4\Delta \eta} - \frac{\frac{h^2}{M} \beta \Big|_s}{2\Delta \xi} \right)$$

$$B = h_p^0 - \Delta t J_P (h_p^0 \tilde{U}_f - h_w^0 \tilde{U}_w^* + h_n^0 \tilde{V}_n^* - h_s^0 \tilde{V}_s^*)$$

Como já comentado, para o caso de fronteira com saída de massa, utilizaremos a condição **Localmente Parabólica**, isto é, para esta fronteira se considera a variação de qualquer propriedade na normal à fronteira desprezível, ou seja os fluxos difusivos normais à fronteira serão nulos. Por exemplo, para a fronteira leste da Fig. 4.3, temos que as componentes cartesianas do vetor velocidade não variam na direção ξ logo, a velocidade contravariante na direção ξ não varia. Numericamente expressamos isto da seguinte maneira

$$\tilde{U}_e = \tilde{U}_w \tag{4.55}$$

Ainda, deve-se anular o termo que representa o fluxo difusivo na face e , na Eq. (4.13), é dizer

$$h \Gamma^\phi J \alpha \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Delta \eta \Big|_e - h \Gamma^\phi J \beta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \Delta \eta \Big|_e = 0 \tag{4.56}$$

Considerando as Eqs. (4.55) e (4.56), pode-se obter uma equação para a convecção-difusão de ϕ no volume P da Fig. 4.3 para a condição localmente

parabólica na face e . A forma desta equação é similar à Eq. (4.49) porém sem os termos representativos dos volumes E , NE e SE , ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{M_P}{\Delta t} \phi_P + A_P \phi_P^0 &= A_w \phi_w^0 + A_n \phi_n^0 + A_s \phi_s^0 + \\ &+ A_{nw} \phi_{NW}^0 + A_{sw} \phi_{SW}^0 + \frac{M_P^0}{\Delta t} \phi_P^0 + \hat{S} \Delta V \end{aligned} \quad (4.57)$$

A forma dos coeficientes é a mesma dos mostrados na Eq. (4.50), porém a vazão mássica na face leste, dada pela Eq. (4.21) é avaliada a partir da velocidade contravariante na face oeste,

$$\begin{aligned} \dot{M}_e &= (\rho \tilde{U})_w h_p \Delta \eta \\ \dot{M}_w &= (\rho \tilde{U} h)_w \Delta \eta \\ \dot{M}_n &= (\rho \tilde{V} h)_n \Delta \xi \\ \dot{M}_s &= (\rho \tilde{V} h)_s \Delta \xi \end{aligned} \quad (4.58)$$

e as difisividades na face leste devem ser anuladas, ou seja,

$$D_{11e} = D_{12e} = 0 \quad (4.59)$$

Estas difusividades deverão ser anuladas tanto nos coeficientes quanto no termo fonte.

Para a equação da conservação da massa, temos, no caso de fronteira com saída de massa, considerando a Eq. (4.55),

$$h_p = h_p^0 - \rho J_P \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left[\left(h_p^0 \tilde{U} \Big|_w - h^0 \tilde{U} \Big|_w \right) - \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left[\left(h^0 \tilde{V} \Big|_n - h^0 \tilde{V} \Big|_s \right) \right] \right] \quad (4.60)$$

Quando as velocidades contravariantes são substituídas na equação acima, obtém-se uma equação similar à obtida para o caso de condição de velocidade prescrita, Eq. (4.53). Apenas o termo fonte muda para,

$$B = h_p^0 - \Delta t J_P \left(h_p^0 \tilde{U}_w - h_w^0 \tilde{U}_w^* + h_n^0 \tilde{V}_n^* - h_s^0 \tilde{V}_s^* \right) \quad (4.61)$$

A velocidade \tilde{U}_w é a velocidade contravariante na face w avaliada a partir dos valores disponíveis das velocidades cartesianas,

$$\tilde{U}_w = y_\eta u_w - x_\eta v_w \quad (4.62)$$

Não deve-se confundir \tilde{U}_w com \tilde{U}_w^* , já que este último termo contém as equações explícitas da convecção-difusão (ver Eq. (4.36)), isto é, as equações do movimento mas sem o termo de pressão (espessura).

Uma vez obtidas as equações discretizadas para o volume da fronteira leste, podem-se obter analogamente as equações para os restantes volumes de fronteira.

4.2.4 Procedimento de solução

O sistema de equações a ser resolvido, consiste em três equações diferenciais com três incógnitas, u , v e h . Estas três equações são acopladas e ainda as equações da quantidade de movimento são não lineares. As não linearidades não precisam de tratamento, ou seja não é necessário iterar dentro de um mesmo nível temporal, já que se resolvem as equações em forma explícita e os produtos $A_i \phi_i$ são avaliados em um mesmo intervalo temporal. Tampouco serão tratados os acoplamentos dentro de um mesmo intervalo temporal. Como sugerido por Casulli e Cheng (1992), para o problema de águas rasas, para cada intervalo temporal será resolvida apenas uma vez cada equação. Este procedimento demonstrou ter bons resultados e grande economia de tempo computacional. Ainda, pelo fato de serem substituídas as equações do movimento na forma completa, e não equações de correção, como nos métodos tradicionais preditivo-corretivos, a massa total se conserva exatamente para cada intervalo temporal sempre que a equação para h seja resolvida até a convergência. Este fato foi comprovado através dos resultados numéricos.

O algoritmo de solução utilizado foi o seguinte:

1. Inicializar as variáveis: Em todos os casos as velocidades iniciais foram consideradas nulas. Dependendo do tipo de problema, a espessura pode ter um valor inicial, por exemplo, quando se trata de um derrame

instantâneo⁹. Neste caso, se consideram os volumes ocupados pela mancha inicial como possuindo uma certa espessura e os restantes volumes com um espessura inicial de 1×10^{-15} (lembramos que pelo tipo de função de interpolação utilizada, a espessura não pode ser nula).

2. Se calculam os coeficientes da equação da convecção-difusão.
3. Se calculam os campos de velocidades (componentes cartesianas) através das Eqs. (4.30) e (4.31). Este cálculo é explícito e nenhum sistema de equações deve ser resolvido.
4. Recalcular os coeficientes da equação da convecção-difusão. Como o Operador Convectivo-Difusivo Explícito Não Linear será usado para o cálculo da espessura, os coeficientes devem ser calculados a partir das últimas velocidades, desta forma, quando este operador for substituído na equação da conservação da massa, as velocidades que aparecem nos coeficientes serão as mesmas que estes multiplicam.
5. Calcular o campo de espessuras da mancha de óleo, Eq. (4.42). Estas espessuras serão resolvidas em forma implícita e portanto deve ser resolvido um sistema de equações lineares.
6. Calcular as entradas e saídas de massa do domínio de cálculo. Neste ponto são considerados todos os fatores como Evaporação, Diluição, Floculação, Fontes Poluentes, etc., que podem incrementar o diminuir a massa total presente na superfície d'água. Neste trabalho serão consideradas apenas a Evaporação e as Fontes Poluentes. Estas últimas serão utilizadas no caso de vazamentos prolongados que não podem ser considerados derrames instantâneos.
7. Avança-se no tempo.

O solver utilizado para a resolução do sistema de equações resultante da equação da massa foi o método de Gauss-Seidel. Mesmo sendo este um método

⁹Quando um grande volume de petróleo é derramado em um intervalo temporal pequeno, pode-se considerar como que este volume é colocado subitamente na superfície do mar.

ponto a ponto, demonstrou ter boa performance, já que a convergência desejada é atingida em 10 a 20 iterações nos primeiros intervalos temporais, reduzindo-se a 5 a 10 posteriormente, quando o campo de espessura é mais uniforme. Isto para um derrame instantâneo, onde os gradientes de espessura iniciais são grandes. No caso de um derrame contínuo, geralmente o nível de convergência desejado se atinge em 6 a 8 iterações. O autor acredita que esta rápida convergência, ainda utilizando um método ponto a ponto, se deva ao tipo de problema sendo aqui tratado onde a informação deve-se propagar apenas na região do domínio onde se encontra a mancha, diferentemente daqueles problemas onde a informação deve-se propagar desde os contornos para todo o interior do domínio. Este é o caso das equações de Águas Rasas, para o qual Casulli e Cheng (1992) propõem o método do Gradiente Conjugado para a solução do sistema linear.

4.3 Evaporação

Nesta seção descreveremos como será considerada a evaporação dentro do esquema numérico. Um dos modelos atualmente mais utilizados para avaliar a evaporação em modelos de trajetória de derrames, e que será utilizado neste trabalho, é o apresentado por Stiver e Mackay (1984). Apresenta-se, a seguir, uma descrição sucinta da fundamentação teórica deste modelo e logo após a descrição da incorporação do modelo de evaporação ao modelo numérico.

4.3.1 Fundamentação Teórica

Para uma substância pura, a taxa de evaporação em mol/s, é dada por

$$N = \frac{dn}{dt} = \frac{KAP_v}{RT} \quad (4.63)$$

Ou, em termos de fração volumétrica evaporada,

$$\frac{dF_v}{dt} = \frac{KA_vP_v}{V_0RT} \quad (4.64)$$

A equação acima, pode ser expressada como

$$dF_v = \frac{P_v}{RT} \frac{KAdt}{V_0} = Hd\theta \quad (4.65)$$

O primeiro parâmetro, P_v/RT , cujo significado físico é a relação entre a concentração de equilíbrio na fase gasosa e a da fase líquida, é chamado de Lei de Henry, representada em forma adimensional.

O termo $KAdt/V_0$ é chamado “exposição evaporativa” e pode ser definido como a relação entre o volume de vapor exposto a evaporação e o volume inicial de líquido.

Quando se trata de um sistema multicomponente, a temperatura de ebulição varia com a fração volumétrica evaporada e, portanto, também varia o parâmetro H . Para conhecer H em função de F_v deveríamos conhecer os calores latentes de evaporação de cada um dos componentes do petróleo. Como estes dados são difíceis de obter é comumente utilizado o modelo proposto por Stiver e Mackay (1984), no qual é utilizada a equação de Clausius-Clapeyron para relacionar a pressão de vapor com a temperatura, e uma aproximação linear para a relação entre a temperatura de ebulição e a fração volumétrica evaporada. Isto significa que a temperatura de ebulição aumenta linearmente conforme o óleo vai se evaporando.

Da equação de Clausius-Clapeyron, temos que

$$\ln\left(\frac{P}{P_a}\right) = B\left(1 - \frac{T_B}{T}\right) \quad (4.66)$$

Onde o parâmetro adimensional $B = r/RT_B$, é a relação entre o calor de vaporização r e a temperatura de ebulição do líquido à pressão normal (101325 Pa) vezes a constante dos gases. Este parâmetro varia segundo a regra de Trouton entre 9.85 e 11.3 (Kirillin *et alii* (1976)). Logo, H pode ser calculado como

$$\ln H = \ln\left(\frac{P_v}{RT}\right) + B - \frac{BT_B}{T} \quad (4.67)$$

Considerando agora uma relação linear entre a temperatura de ebulição da mistura (óleo) e a fração volumétrica evaporada, temos

$$T_B = T_0 + T_G F_v \quad (4.68)$$

onde T_0 é a temperatura de ebulição inicial e T_G é a inclinação da reta T_B em função de F_v . Combinando as Eqs. (4.65), (4.67) e (4.68), temos

$$\frac{dF_v}{dt} = \exp\left[A - B \frac{(T_0 + T_G F_v)}{T} \right] \frac{KA}{V_0} \quad (4.69)$$

onde

$$A = \ln\left(\frac{P_a v}{RT} \right) + B \quad (4.70)$$

Para obter uma forma mais simples da Eq. (4.69) podem-se definir novos parâmetros ajustáveis como

$$\ln H_0 = A - BT_0/T \quad (4.71)$$

e

$$Q = BT_G/T \quad (4.72)$$

Logo, a Eq. (4.69) fica

$$\frac{dF_v}{dt} = \exp[H_0 - QF_v] \frac{KA}{V_0} \quad (4.73)$$

Esta última forma da equação foi utilizada no modelo de Shen e Yapa (1988) e será usada neste trabalho.

Os valores para T_0 e T_G podem ser extraídos do trabalho de Shen e Yapa (1988). Nesse trabalho, é utilizada uma equação para Q em função do grau API do petróleo como

$$Q = 1158.9 API^{-1.1435} \quad (4.74)$$

Logo, da Eq. (4.72), temos

$$T_G = 1158.9 API^{-1.1435} (T/B) \quad (4.75)$$

onde T é a temperatura da superfície da mancha, geralmente tomada como a temperatura ambiente. A temperatura de ebulição inicial é uma propriedade do tipo de óleo e pode ser calculada, segundo Shen e Yapa (1988), como

$$T_0 = 542.6 - 30.275API + 1.565API^2 - 0.03439API^3 + 0.0002604API^4 \quad (4.76)$$

4.3.2 Incorporação ao Modelo Numérico

O coeficiente de transferência de massa K_m para um derrame exposto ao meio ambiente é de difícil estimativa teórica. Neste trabalho será utilizado um modelo proposto por Cuesta *et alii* (1990) que avalia este coeficiente através da seguinte relação empírica

$$K_m = 0.0015 \cdot W^{0.78} \quad (4.77)$$

onde W é a velocidade do vento no local do derrame.

Como a nossa variável de cálculo para a equação da conservação da massa é a espessura do óleo, devemos expressar a fração volumétrica evaporada F_v em função desta espessura. Assim para cada volume de controle, temos

$$F_v = \frac{V_{\text{evaporado}}}{V_{\text{inicial}}} = \frac{V_{\text{inicial}} - V_{\text{final}}}{V_{\text{inicial}}} = \frac{\text{Area} \cdot (h^0 - h)}{\text{Area} \cdot h^0} \quad (4.78)$$

Logo, como proposto por Cuesta *et alii* (1990), para cada intervalo temporal é calculado o incremento na fração volumétrica integrando no tempo a Eq. (4.73), obtendo-se

$$\Delta F_v = \exp[H_0 - QF_v] \frac{K_m A}{V_0} \Delta t \quad (4.79)$$

Assim, a fração volumétrica evaporada é calculada em cada intervalo temporal como

$$F_v = F_v^0 + \Delta F_v \quad (4.80)$$

Finalmente o decremento na espessura da mancha (passo 6 do algoritmo apresentado) é calculado como,

$$h = h^0(1 - F_v) \quad (4.81)$$

4.4 Fontes Poluentes

Quando os vazamentos de óleo são prolongados, não se pode considerar que a massa total de óleo derramada aparece subitamente na superfície d'água. Para estes casos foram implementadas no modelo computacional fontes poluentes contínuas. A concepção teórica é simples, apenas se supõe que em determinados volumes de controle, onde são consideradas estas fontes, existe uma injeção de massa de óleo variável com o tempo. Para os volumes que possuem fontes poluentes, o aumento de espessura em um intervalo temporal se calcula por

$$h = \frac{\dot{m}\Delta t}{\rho A} \quad (4.82)$$

onde \dot{m} é a vazão mássica sendo derramada pela fonte e A é a área do volume de controle. No código computacional foram consideradas duas variações da vazão mássica derramada com o tempo, constante e linear, de forma a considerar possíveis variações de vazão em um eventual rompimento de um oleoduto. Para ambos tipos de fontes deve ser definido um tempo inicial, um tempo final e o valor da vazão, no caso de fonte constante, e a variação temporal para a fonte linear.

Devido à presença destas fontes poluentes, a evaporação e outros processos de transferência de massa que não foram considerados neste modelo, a massa presente na superfície d'água não é constante. No caso de fronteiras abertas existe massa de óleo saindo do domínio, ainda na superfície d'água. Por isto, é importante a avaliação da massa presente na superfície d'água.

Esta massa é calculada como:

$$M_{sup.} = \sum \frac{\rho h_p \Delta \xi \Delta \eta}{J_p} \quad (4.83)$$

Este parâmetro foi utilizado para avaliar o funcionamento do algoritmo de resolução das equações de conservação da massa e quantidade de movimento. Se observa nas simulações que para o caso de fronteiras impermeáveis, sem evaporação

nem fontes poluentes, a massa na superfície d'água é exatamente constante ao longo do tempo. O autor considerou este um bom parâmetro para a verificação da conservação da massa já que é calculado independentemente dos balanços de massa em cada volume de controle.

5. Validação do Modelo e Resultados

O propósito deste capítulo é tentar validar o modelo matemático junto com o modelo numérico. Esta tarefa não é de fácil realização já que tanto o modelo matemático quanto o numérico não tem sido validados na literatura e não se dispõe de soluções comparativas. O modelo matemático é original pelo fato de serem resolvidas as equações da conservação de massa e quantidade de movimento, aplicadas à mancha de óleo, na forma completa, incluindo todos os termos. O modelo que provavelmente maior similaridade tem com este é o apresentado por Hess e Kerr (1979), mas este último despreza as acelerações convectivas e as tensões internas dentro do óleo. Como já foi mencionado no Cap. 3, salvo fortes estreitamentos na geometria, as tensões internas dentro do óleo são desprezíveis já que os gradientes de velocidade horizontais são muito pequenos. Este fato foi corroborado através de testes numéricos.

As modificações introduzidas no método semi-implícito descrito por Casulli e Cheng (1992), já comentadas no Cap. 4, consistem na utilização do método dos volumes finitos para a discretização das equações fazendo-se uso de coordenadas curvilíneas generalizadas para representar de melhor maneira as irregulares geografias costeiras. Não é de conhecimento do autor a existência de um modelo numérico com estas características. Surgem, portanto, duas dificuldades para a validação do modelo, o problema de trabalhar com as equações de conservação na forma completa, já que não se possuem soluções comparativas, a exceção das dadas por Fay (1969) para o espalhamento em águas calmas, e as dificuldades que surgem por causa das modificações feitas no modelo numérico.

Para o caso em que o corpo d'água que suporta a mancha de óleo esteja em movimento, ou para quando existem ventos que provocam o arraste da mancha de petróleo, não se conhecem na literatura soluções comparativas. Geralmente as soluções são comparadas com dados obtidos em campo em derrames reais. Para que esta comparação seja válida deve-se dispor de dados de entrada confiáveis, isto é

deve-se dispor dos campos de correntes e ventos no local e no momento do derrame com bom grau de fidelidade. Como não é o objetivo deste trabalho obter estes dados, seja através de modelos numéricos (por exemplo resolvendo as Eqs. de Águas Rasas) ou medições de campo, este modelo não será validado através da comparação com derrames reais. Serão sim, mostrados logo mais resultados de simulações em derrames reais, não com o intuito de validar o modelo mas sim para mostrar as potencialidades do mesmo.

A seguir, será resolvido, fazendo-se uso do código computacional implementado, o problema do espalhamento axi-simétrico (derrame em águas calmas e sem vento no local) no qual se procura validar o modelo através da comparação com as soluções semi-empíricas de Fay (1971). Depois resolveremos um problema de espalhamento e transporte unidimensional através do qual será descrito o funcionamento do modelo para o caso em que exista um transporte da mancha de óleo dado por correntes ou ventos. Ainda, será resolvido um problema de espalhamento e transporte 2D, para uma mancha inicialmente circular, com o intuito de mostrar o alongamento da mancha no sentido das correntes e ventos e os efeitos dos diferentes tipos de condições de contorno. Finalmente, serão simulados eventuais derrames por rompimento do oleoduto nas cercanias do porto de São Francisco do Sul, onde um oleoduto se estende 9 km mar adentro, para evitar a entrada no porto dos tanqueros, através do qual um dispositivo realiza as cargas e descargas de óleo.

5.1 Problema do espalhamento axi-simétrico

Como já foi mencionado, os primeiros trabalhos que surgiram tentando modelar a trajetória de manchas de petróleo (Fay, 1969, Fanelop e Waldman, 1971, Hoult, 1972, DiPietro *et alii*, 1978, entre outros), consideravam o espalhamento unidimensional ou axi-simétrico em águas totalmente calmas. Alguns modelos levavam em conta os efeitos das correntes ou ventos considerando que o centro de massa da mancha se move com a velocidade de transporte, descrita no capítulo 3, mas mantendo sua forma circular. Nesse capítulo, também foi comentada a inadequação desta hipótese, já que em derrames reais, onde existe a influência das correntes e dos ventos, a forma da mancha dista muito de ser circular, já que ela tende a se alongar no sentido das correntes e dos ventos. Mesmo assim, pelo fato de se possuírem soluções

analíticas, o problema do espalhamento axi-simétrico foi considerado para testar o modelo numérico.

Descreveremos a seguir o problema do espalhamento axi-simétrico, mostrado esquematicamente na Fig. 5.1, e em seguida serão comparados os resultados obtidos numericamente com as soluções de Fay (1971).

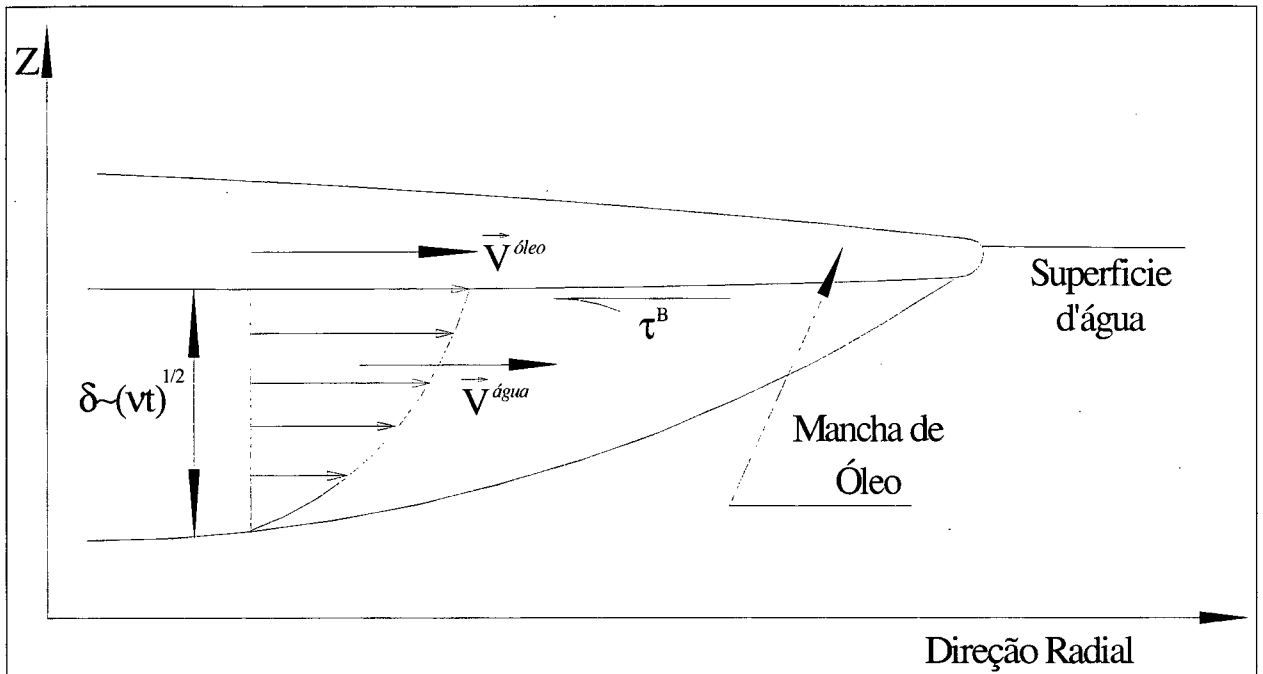


Fig. 5.1: Esquema mostrando o modelo $2D_{YZ}$, para o espalhamento axi-simétrico e as variáveis utilizadas no modelo apresentado neste trabalho

Nos trabalhos que procuram modelar este problema (em forma teórica), a tensão entre óleo e água, aparece como resultado do problema e não precisam-se utilizar correlações para avaliar as mesmas, já que nesses casos é utilizado um modelo $2D_{YZ}$ onde são resolvidos os campos de velocidades do óleo e a camada limite da água. Deve-se deixar claro que neste problema o movimento da água é causado pelo movimento do óleo, diferentemente de problemas reais onde a mancha é arrastada pelas correntes e os ventos.

A metodologia seguida normalmente nos modelos $2D_{YZ}$ (Fay, 1969, Hout, 1972, Buckmaster, 1973, entre outros) é considerar o óleo atuando na superfície d'água como sendo uma placa posta subitamente em movimento e estudando a camada limite transiente originada na superfície da água. Logo, a velocidade característica desta

camada limite é a velocidade do óleo, portanto, a tensão atuante no fundo da mancha de óleo, é da ordem de:

$$\tau_i^B \sim \mu \frac{\mathbf{u}_i}{\delta_h} \quad (5.1)$$

onde δ_h é a espessura da camada limite estabelecida na superfície d'água. Fazendo uma análise da ordem de grandeza das equações da camada limite transiente (para maiores detalhes ver por exemplo Bejan, 1995, Cap. 5), temos que esta espessura é da ordem de

$$\delta_h \sim \sqrt{\nu t} \quad (5.2)$$

onde ν é a viscosidade cinemática da água.

Logo, a tensão de corte exercida pela água sobre a mancha pode ser avaliada, para este problema, como:

$$\tau_i^B = C \frac{\mathbf{u}_i}{\sqrt{\nu t}} = \frac{C'}{(t)^{1/2}} \mathbf{u}_i \quad (5.3)$$

onde C' , é uma constante.

Utilizando-se este modelo para a tensão cisalhante no fundo da mancha foi resolvido o problema do espalhamento axi-simétrico. Foi considerado um derrame instantâneo em águas totalmente calmas. O derrame consiste em uma mancha circular com espessura inicial constante de 10 cm. Observou-se em resultados de simulações que este valor da espessura inicial permite identificar claramente a primeira etapa do espalhamento, isto é a etapa gravitacional-inercial. Como já foi comentado, as forças retardadoras do espalhamento dependem da espessura da mancha. Se esta for muito pequena, não será captada a etapa inercial do espalhamento, para mostrar isso, na Fig. 5.2 é apresentado um gráfico do raio da mancha em função do tempo para uma simulação considerando uma espessura inicial de 1cm. Observa-se que quase não existe concordância com a solução de Fay (1971) para a etapa inercial, isto porque a espessura média da mancha cai rapidamente para valores em que as forças inerciais passam a ser desprezíveis frente às viscosas.

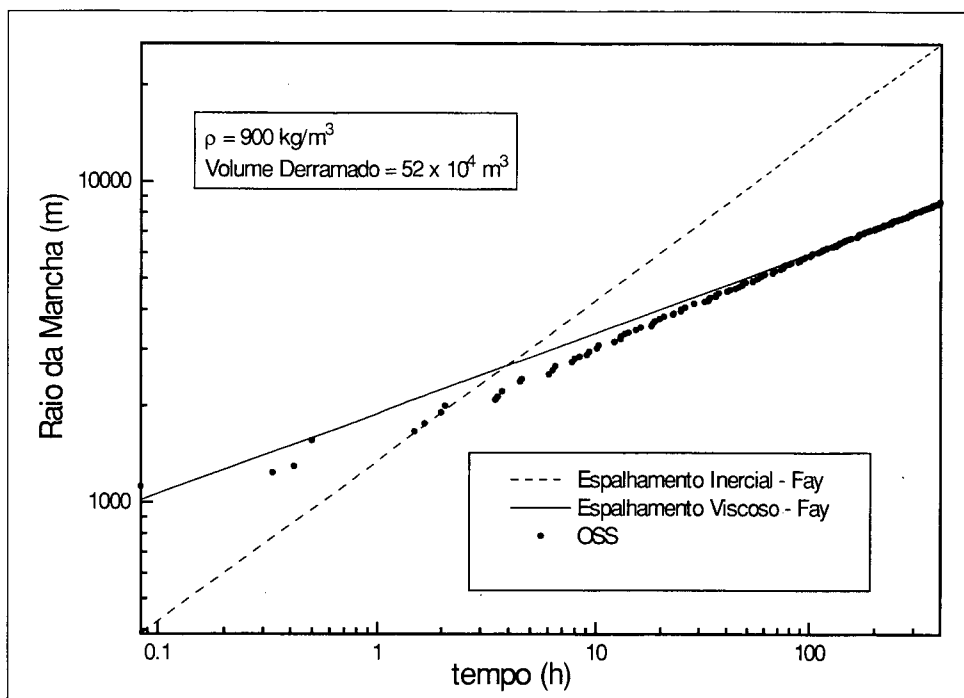


Fig. 5.2:Espalhamento axi-simétrico com espessura inicial de 1 cm.

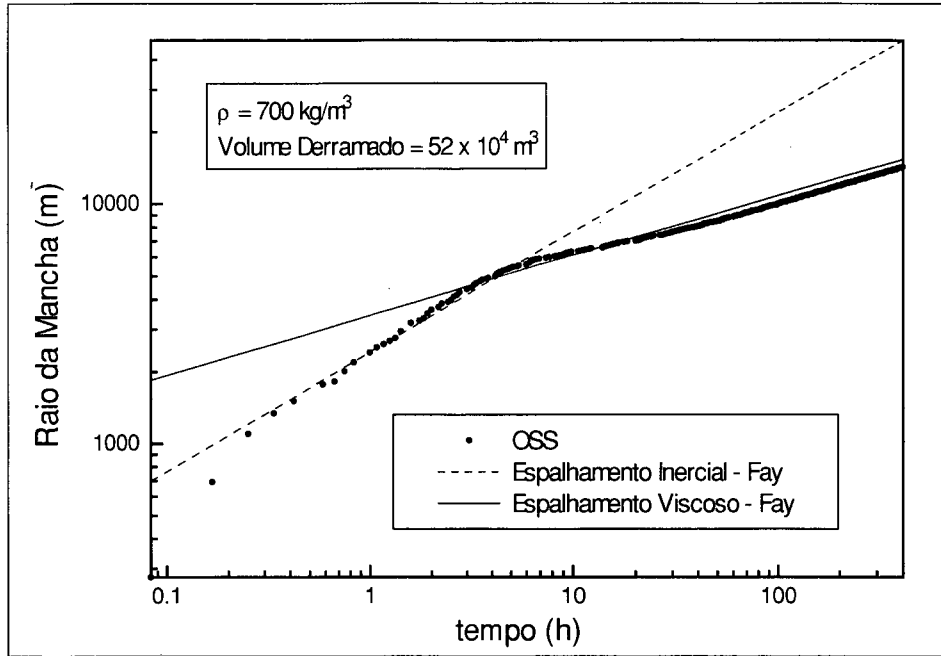
Os resultados obtidos através do modelo aqui apresentado aparecem referenciados como OSS (*Oil Spill Simulator*) já que este é o nome dado ao programa computacional aqui implementado. O nome é dado na língua inglesa para maior penetração do trabalho na comunidade internacional.

As figuras a seguir mostram a variação temporal do raio da mancha para diferentes densidades do óleo e diferentes volumes iniciais e a comparação com as fórmulas apresentadas por Fay (1971). Como comentado no Cap. 4, os limites da mancha devem ser definidos quando não é utilizado um método de seguimento de interface. Novamente o valor de espessura que define os limites da mancha foi tomada como 1×10^{-6} m. Logo, o raio da mancha foi calculado como

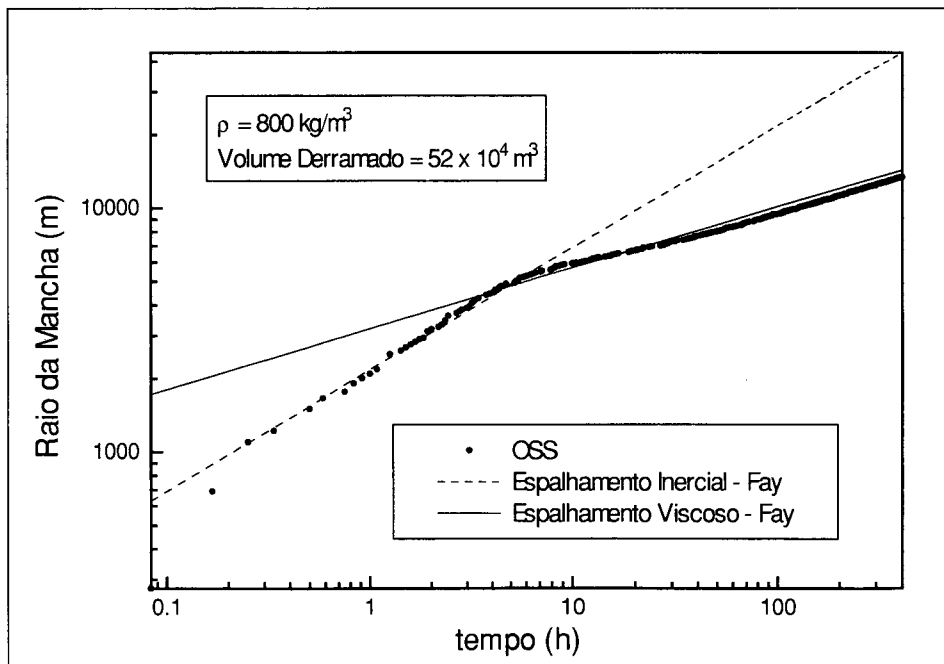
$$r = \sqrt{\frac{Area}{\pi}} - r_{inicial} \tag{5.4}$$

O raio inicial deve ser subtraído para comparar os resultados com as fórmulas de Fay (1971) já que estas não consideram a área inicial da mancha. Foi utilizada uma malha cartesiana de 80x80 volumes com $\Delta x = \Delta y = 500$ m, o que cobre uma área de 40x40 km. Estas dimensões foram adotadas para paralelamente testar o

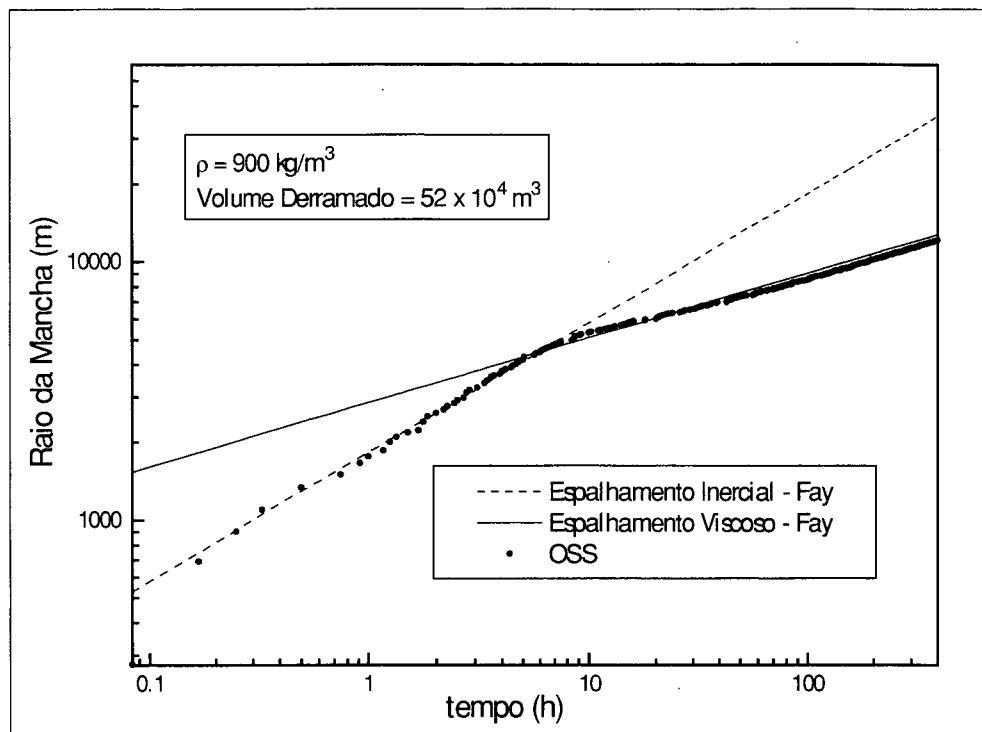
comportamento do modelo numérico com parâmetros da ordem dos que seriam utilizados em simulações de derrames reais.



(a)



(b)

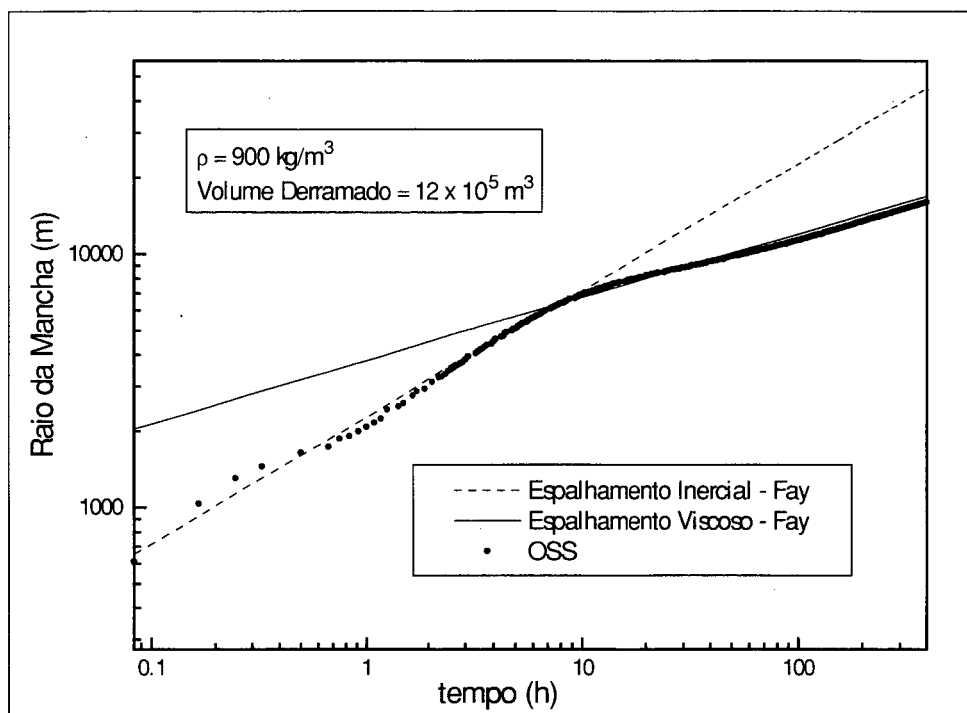


(c)

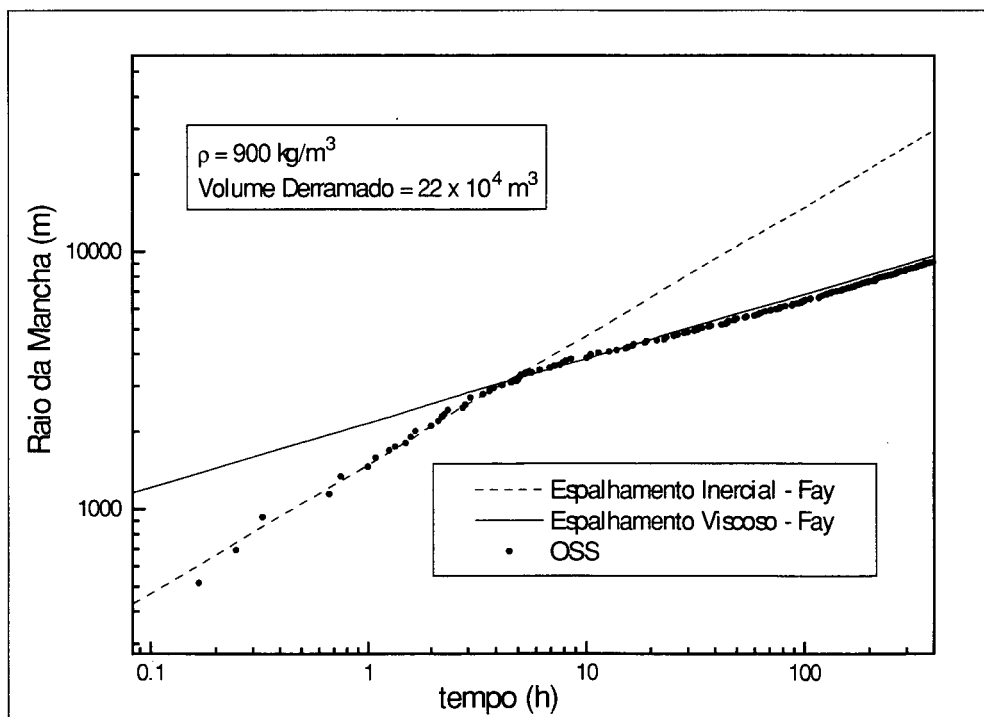
Fig. 5.3: Espalhamento axi-simétrico para um volume inicial de $52 \times 10^4 \text{ m}^3$ e diferentes densidades do óleo, (a) $\rho = 700 \text{ kg/m}^3$, (b) $\rho = 800 \text{ kg/m}^3$, (c) $\rho = 900 \text{ kg/m}^3$.

Observa-se nas figuras que conforme aumenta a densidade, aumenta o tempo da etapa inercial, isto é, se desloca o ponto de transição para direita. Ainda, os valores do raio para um mesmo tempo são maiores, já que o parâmetro Δ (ver Eq. (3.28)) aumenta, e portanto o termo de gravidade, conforme a densidade diminui. Vemos que em todos os casos os resultados concordam com bastante precisão com as soluções semi-empíricas apresentadas por Fay (1971), tanto na etapa gravitacional-inercial quanto na gravitacional-viscosa.

A seguir se apresentam os resultados obtidos para o espalhamento axi-simétrico, ainda comparando-os com as soluções de Fay (1971), para diferentes volumes derramados mantendo em todos os casos a densidade constante igual a 900 kg/m^3 .



(a)



(b)

Fig. 5.4: Espalhamento axi-simétrico para uma densidade $\rho = 900 \text{ kg/m}^3$ para diferentes volumes derramados. Volume. Inicial: (a) $12 \times 10^5 \text{ m}^3$ e (b) $22 \times 10^4 \text{ m}^3$.

Nas simulações para o problema do espalhamento axi-simétrico foram supostos grandes volumes iniciais com o intuito de mostrar claramente a etapa gravitacional-inercial do espalhamento. Esta etapa tende a ser menor conforme é menor o volume inicial, como pode-se ver nas figuras acima, onde o ponto de transição se desloca à direita conforme aumenta o volume inicial. Os maiores volumes vertidos em derrames reais tem sido da ordem de até 200.000 m³.

5.2 Espalhamento e transporte 1D

Será resolvido agora um problema onde é testado o comportamento do modelo em presença de correntes, ou seja quando o corpo de água que suporta a mancha de óleo está em movimento. Cabe esclarecer que no caso anterior a água também move-se, mas o movimento é induzido pelo próprio movimento do óleo. Neste caso o movimento d'água é induzido por outros fatores (em derrames reais estes podem ser marés, ventos, correntes residuais, etc.) e é considerado que a presença do óleo não afeta o campo de velocidades d'água.

Para estudar os efeitos das correntes sobre a mancha de óleo, será resolvido um problema 1D com um campo de velocidades constante na direção x . A Fig. 5.5 mostra esquematicamente o problema a ser resolvido.

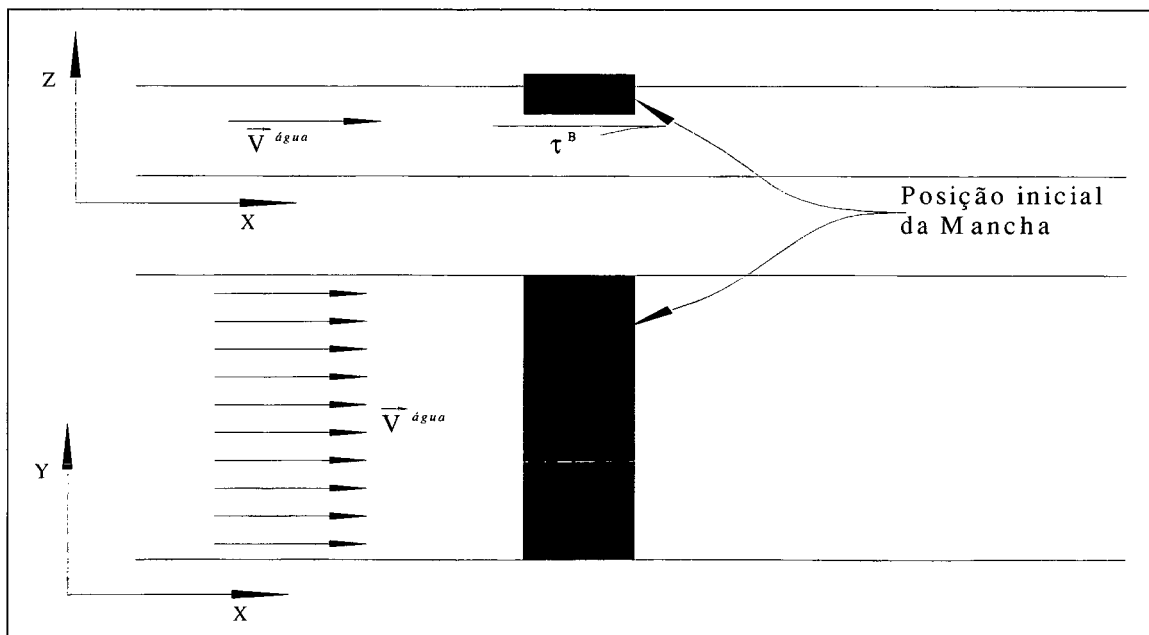


Fig. 5.5: Representação esquemática do problema de espalhamento e transporte 1D.

Considera-se um derrame inicial com uma espessura h_0 e uma velocidade do corpo de água constante no espaço e no tempo. Neste caso, a equação utilizada para avaliar a tensão exercida pela água sobre a mancha foi a proposta por Benqué *et alii* (1982) mostrada no Cap. 3 repetida a seguir por conveniência,

$$\tau_i^B = C_f^{Água} (\mathbf{u}_i^{Óleo} - \mathbf{V}_i^{Água}) \quad (5.5)$$

Resultados serão mostrados para diferentes valores do coeficiente de atrito $C_f^{Água}$ apenas com o intuito de verificar a influência deste parâmetro nos resultados. O valor deste coeficiente utilizado usualmente em modelos em que a tensão é avaliada através de uma função linear da velocidade (modelo de Benqué, 1982, também utilizado por Cuesta *et alii*, 1990), é de $1 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^2\text{s}$ (Idelfonso Cuesta, comunicação pessoal) e é o valor que será utilizado nas simulações de derrames reais. Mesmo assim, este parâmetro, assim como a expressão geral para a tensão de corte entre o óleo e a água, deverão ser objeto de futuros estudos.

Como não se possuem soluções comparativas para quando existe um arraste sobre a mancha de petróleo, seja este causado por correntes ou ventos, a verificação dos resultados aqui obtidos será feita através da posição do centro de massa da mancha. Isto é, será calculada a posição do centro de massa da mancha e comparada com a posição que teria se o centro de gravidade se movimentasse com a velocidade dada pela equação (3.12).

A posição do centro de massa da mancha é calculada por

$$\begin{aligned} X_{CM} &= \frac{\int_{Mancha} (y - y_{ref}) dm}{\int_{Mancha} dm} \\ Y_{CM} &= \frac{\int_{Mancha} (x - x_{ref}) dm}{\int_{Mancha} dm} \end{aligned} \quad (5.6)$$

ou, numericamente, tomando como referência $x_{ref} = y_{ref} = 0$

$$X_{CM} = \frac{\sum y_p \frac{\rho h_p \Delta \xi \Delta \eta}{J_p}}{\sum \frac{\rho h_p \Delta \xi \Delta \eta}{J_p}} \quad (5.7)$$

$$Y_{CM} = \frac{\sum x_p \frac{\rho h_p \Delta \xi \Delta \eta}{J_p}}{\sum \frac{\rho h_p \Delta \xi \Delta \eta}{J_p}}$$

Os resultados foram obtidos com uma espessura inicial $h_0 = 3 \text{ cm}$, velocidade da corrente d'água constante na direção x de 0.5 m/s e largura inicial da mancha de 4000 m . Os resultados são apresentados através de uma visão $2D_{XY}$ da espessura da mancha (Fig. 5.6), ou seja como se fizéssemos um corte ao longo do eixo x da mancha e mostrássemos a distribuição de espessura ao longo deste eixo que se repete infinitamente na direção y .

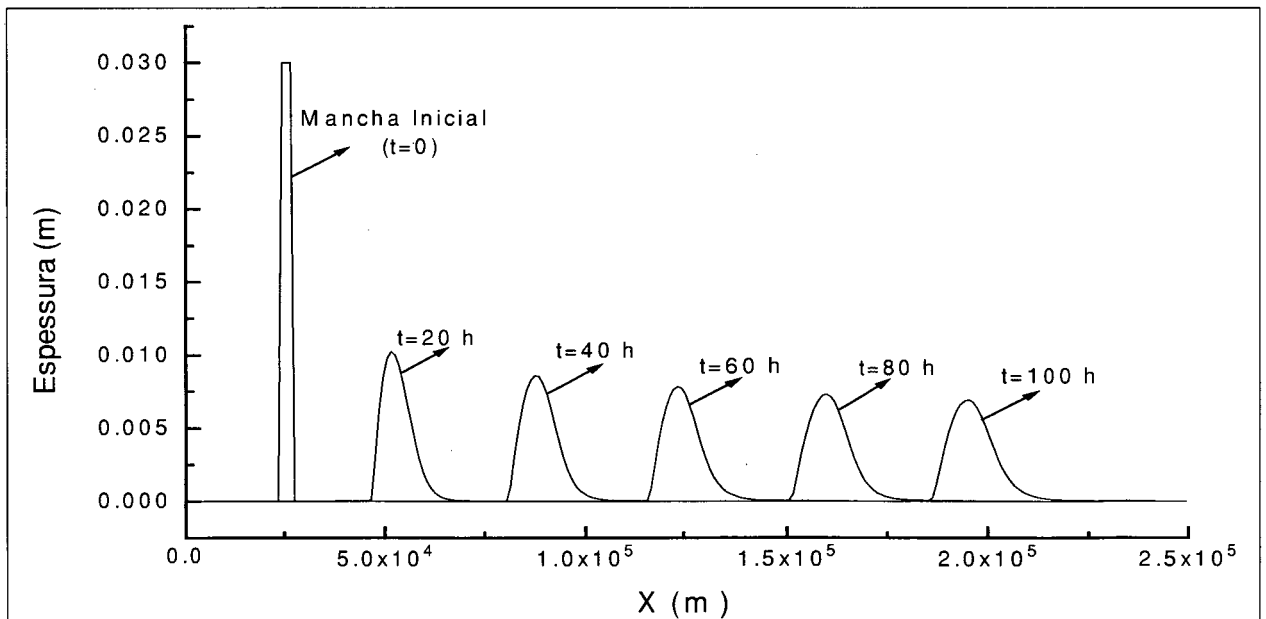


Fig. 5.6: Campo de espessuras, para diferentes tempos, para o espalhamento e arraste 1D.

Note que as escalas da Fig. 5.6 estão distorcidas, pois enquanto o eixo x vai até 250 km, a espessura máxima é de 3 cm.

A Fig. 5.6 nos mostra o deslocamento da mancha e o espalhamento da mesma. Note-se que o espalhamento não é simétrico com relação do centro de massa, pois a mancha tende a se alongar no sentido em que ela é arrastada. Esta fato será melhor explicado no próximo exemplo onde é calculado o espalhamento e arraste de uma mancha inicialmente circular.

Um aspecto interessante, que foi observado nas simulações, é a aceleração do centro de massa da mancha. Este fato é devido aos efeitos da inércia do óleo sobre o movimento da mancha como um todo. Tanto em modelos Lagrangeanos quanto em modelos Eulerianos¹⁰ baseados numa equação de convecção-difusão, e ainda o modelo de Benqué (1982), que mesmo sendo um modelo hidrodinâmico não considera as forças inerciais, o centro de massa da mancha é considerado como movimentando-se com velocidade constante. Alguns modelos Lagrangeanos consideram as forças inerciais mas apenas quando é avaliado o espalhamento da mancha. Isto é, não é considerada a aceleração das parcelas em que é dividida a mancha, e portanto, o centro de massa se movimentará com velocidade constante.

A Fig. 5.7 mostra a variação da posição e a velocidade do centro de massa da mancha, em função do tempo para a simulação apresentada acima (Fig. 5.6).

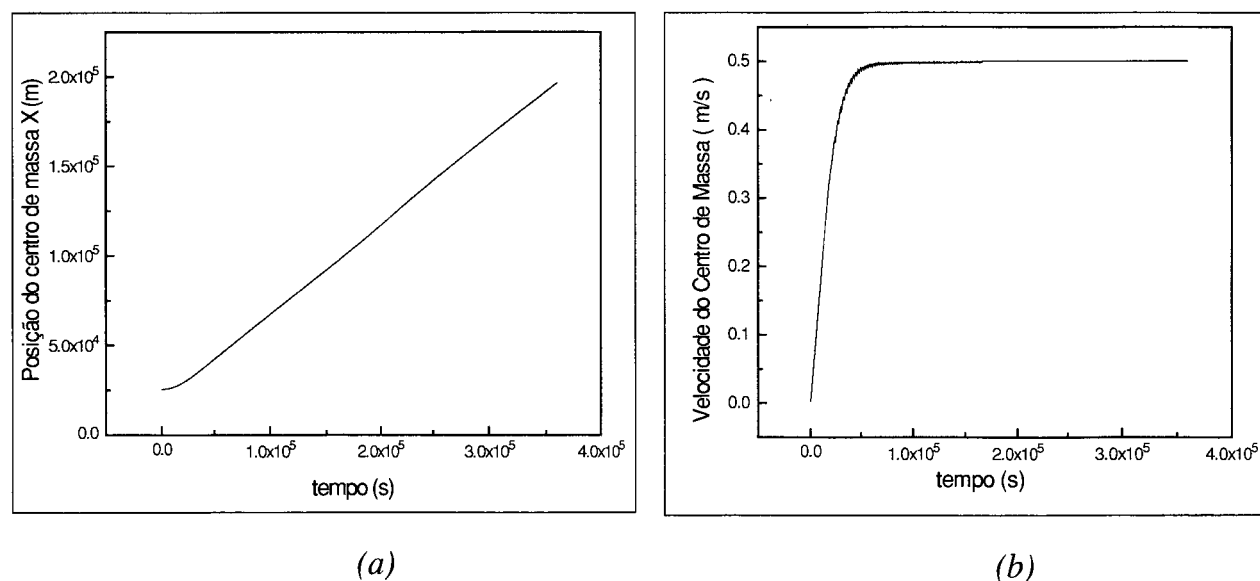


Fig. 5.7: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo com um campo de velocidade d' água constante de 0.5 m/s. (a) Posição, (b) Velocidade

¹⁰ Uma descrição detalhada destes modelos é dada no capítulo 3.

Observe-se que durante as primeiras vinte horas após o derrame o centro de massa se acelera até alcançar uma velocidade de 0.5 m/s . Isto mostra que depois de determinado tempo o centro de massa da mancha se movimenta com a velocidade da corrente da água (neste caso o vento foi desconsiderado) como em modelos Lagrangeanos ou Eulerianos convectivos-difusivos. Assim, podemos concluir que mesmo que as forças inerciais tenham pouca influência no espalhamento já que o tempo que dura esta etapa é em geral pequeno, estas forças são importantes quando consideramos o deslocamento da mancha como um todo. Ainda, quando as velocidades das correntes se invertem, como no caso das correntes de maré, a mancha deveria ser acelerada no sentido contrário mostrando novamente a importância da consideração da inércia do óleo. Na Fig. 5.8, mostra-se a posição e velocidade do centro de massa para o caso em que a velocidade d'água é variável com o tempo. O problema simulado é o mesmo que o apresentado acima, porém a velocidade d'água foi considerada variável senoidalmente com o tempo. A expressão utilizada para a componente u da velocidade, é:

$$u = U \sin\left(\frac{\pi}{45000}t\right) \quad (5.8)$$

com $U = 0.5 \text{ m/s}$.

O objetivo aqui é ver o comportamento da mancha frente a uma corrente com esta variação, que poderiam ser as correntes de maré, que apesar da variação não ser senoidal, possui um comportamento periódico. É por isto que o período de variação das correntes foi feito de 12.5 h o qual corresponde aproximadamente ao primeiro período lunar.

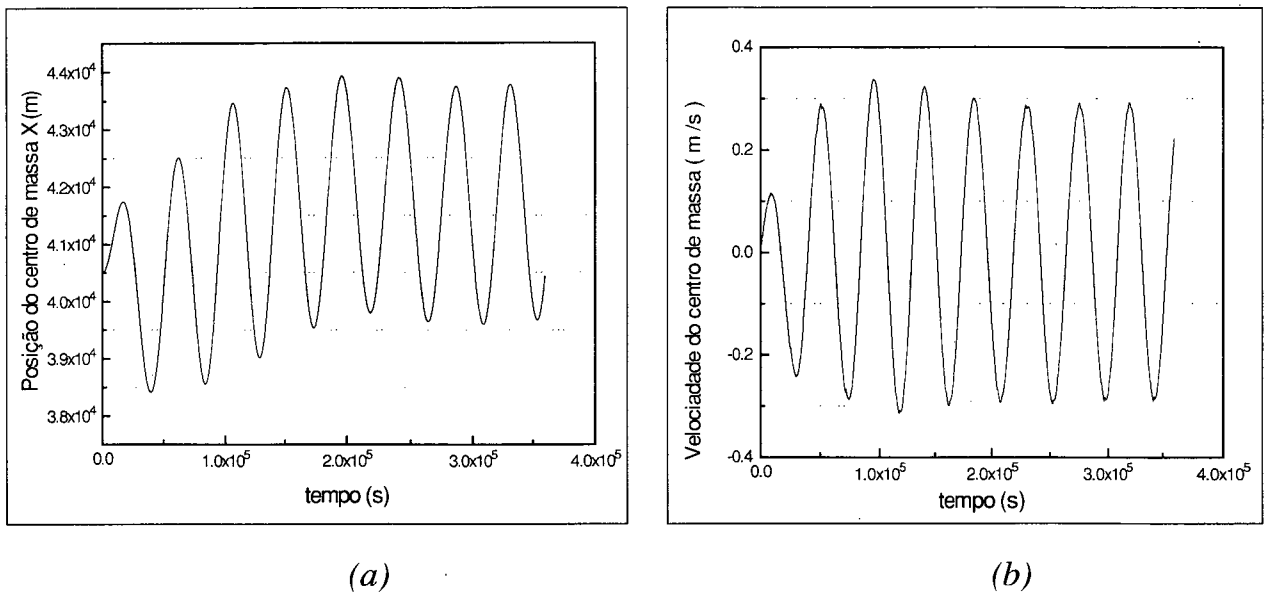


Fig. 5.8: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo com um campo de velocidades d' água constante no espaço e variável senoidalmente no tempo com amplitude de 0.5 m/s e período de 12.5 h. (a) Posição, (b) Velocidade

Observa-se que o centro de massa da mancha se acelera ate atingir um regime permanente periódico com a mancha continuando a se espalhar aumentando a sua superfície. A Fig. 5.9 mostra o campo de espessuras para esta simulação, para diferentes tempos.

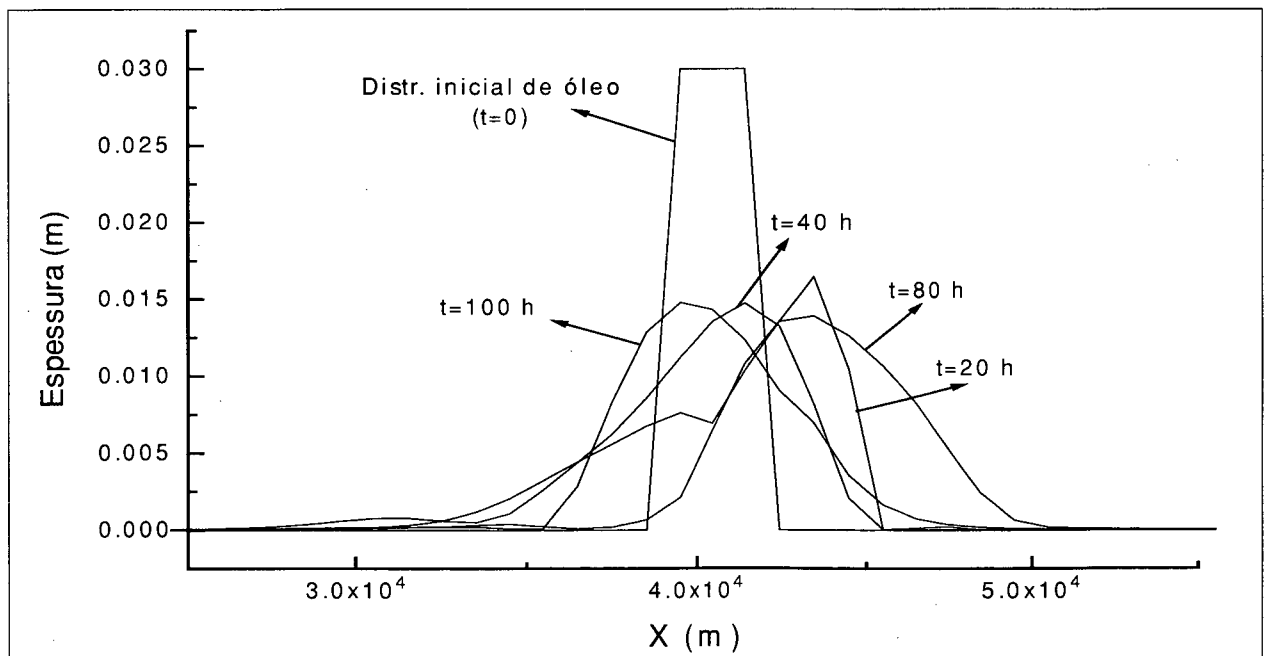


Fig. 5.9: Campo de espessuras para o problema de espalhamento e arraste 1D com um campo de velocidades variável senoidalmente no tempo

Apresentaremos agora resultados para diferentes valores do coeficiente de atrito entre água e óleo. Como já comentado, o objetivo aqui é apenas observar a influência deste parâmetro no espalhamento e arraste da mancha de óleo. Foi resolvido o mesmo problema anterior com velocidade d'água constante de 0.5 m/s , porém, desta vez, foram utilizados diferentes valores de $C_f^{\text{Água}}$. Os valores de espessura se apresentam para um único tempo (50 h) para dar maior clareza na visualização dos resultados (Fig. 5.10).

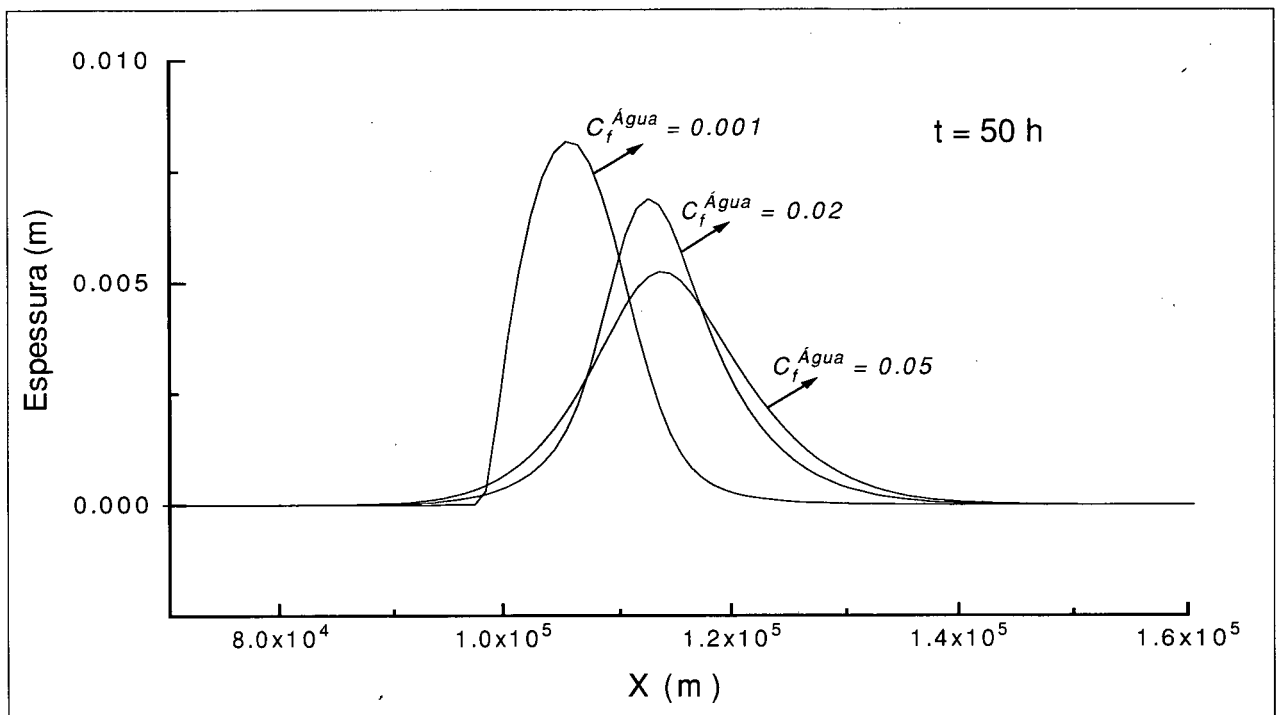


Fig. 5.10: Campo de espessuras da mancha para diferentes valores de $C_f^{\text{Água}}$

Pode-se observar que o aumento do $C_f^{\text{Água}}$ aumenta o alongamento da mancha no sentido da corrente e também aumenta o deslocamento do centro de massa. Este aumento do deslocamento depende da etapa de aceleração da mancha já que a velocidade final atingida independe deste valor, como se vê na Fig. 5.11, que mostra o deslocamento e a velocidade do centro de massa da mancha para os casos mostrados na Fig. 5.10. Isto se deve ao fato que a tensão cisalhante exercida pela corrente d'água sobre a mancha depende da velocidade relativa entre o óleo e a água (Eq. (5.5)). Assim, mesmo esta força sendo grande para valores grandes do coeficiente de atrito, em um determinado momento, depende do coeficiente de atrito, o óleo adquirirá

a velocidade d'água, tornando esta força nula. Não é assim no caso da tensão exercida pelo vento sobre a mancha, já que esta tensão é constante quando a velocidade do vento é constante. Logo esta força acelerará a mancha até que o atrito com a água contrabalance esta força ou seja,

$$C_f^{água} \mathbf{u}_i^{óleo} = C_f^{água} \mathbf{V}_i^{água} + C_f^{vento} \mathbf{V}_i^{vento} \quad (5.9)$$

Neste trabalho C_f^{vento} é normalmente feito igual a 3×10^{-5} .

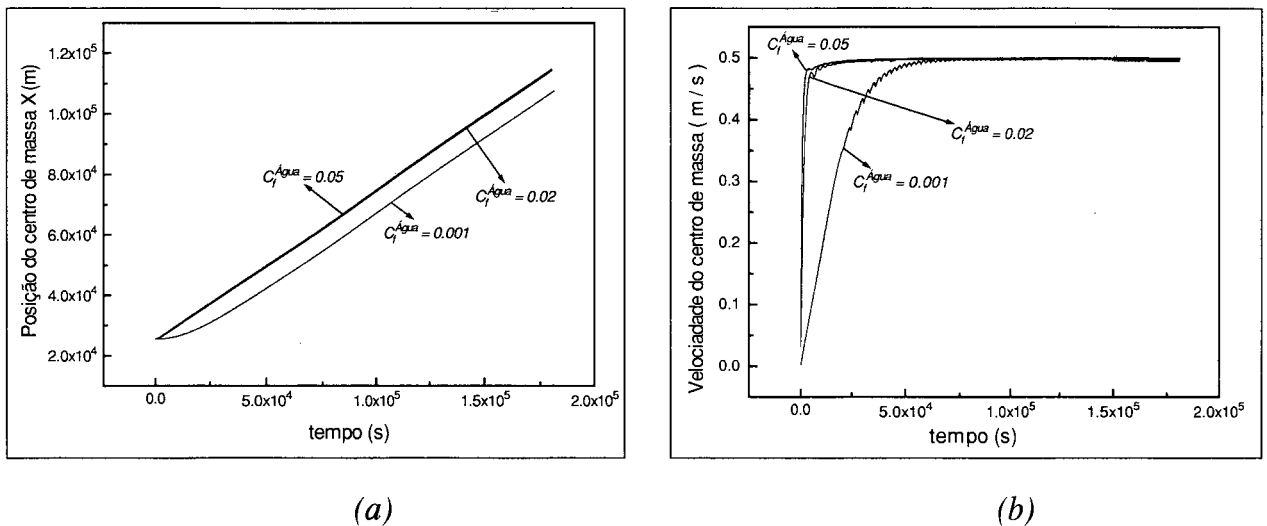


Fig. 5.11: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo com um campo de velocidade constante d'água de 0.5 m/s e diferentes valores de $C_f^{água}$. (a) Posição, (b) Velocidade

A velocidade do óleo que satisfaz este balanço é, aproximadamente 3 % da velocidade do vento. Isto é conhecido na literatura como “regra do 3 %” e significa que, não havendo arraste da água, o óleo atinge aproximadamente entre 3 a 4 % da velocidade do vento medida a 10 m sobre a superfície d'água. Tanto é assim, que em modelos que utilizam o conceito de velocidade total de transporte (Eq. (3.12)), o valor de α_2 que representa a influência do vento, é geralmente tomado como 0.03, ou seja 3 %. A seguir, se mostram os resultados de uma simulação para o caso em que a velocidade da água é nula e a velocidade do vento a 10 m sobre a superfície e de 5 m/s. Pode-se observar que a velocidade final atingida pelo centro de massa da mancha corresponde a 0.15 m/s, isto é 3 % da velocidade do vento (Fig. 5.13).

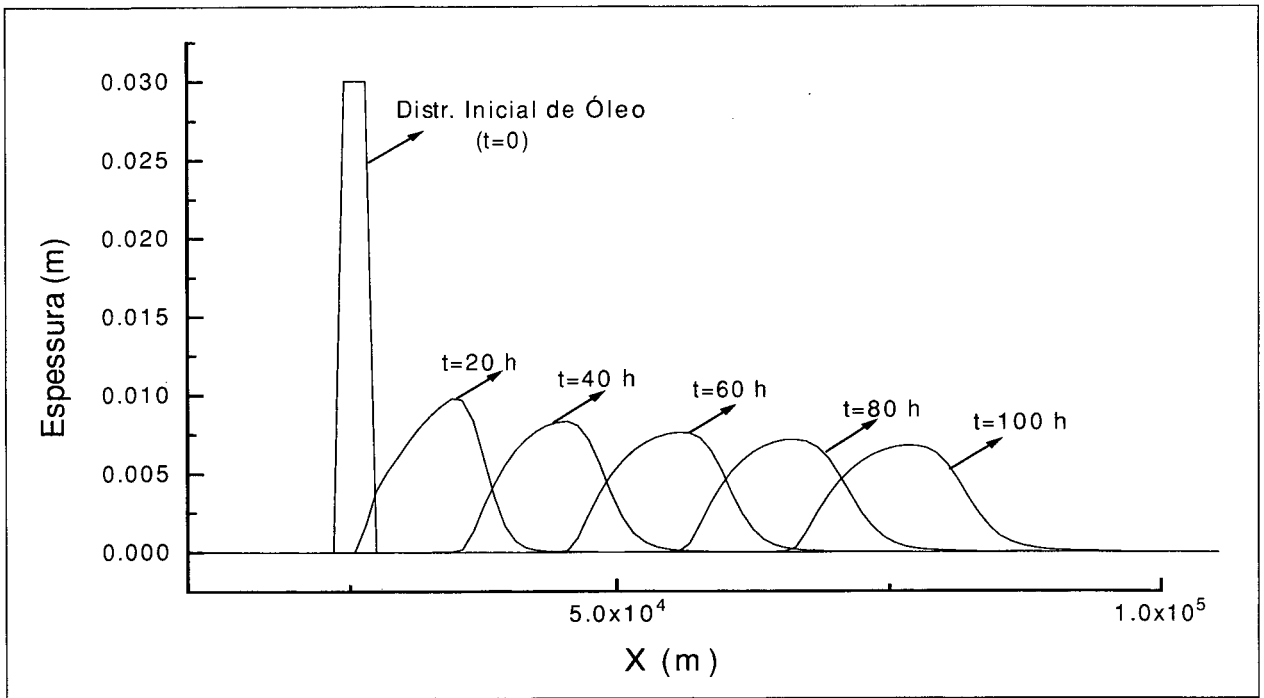
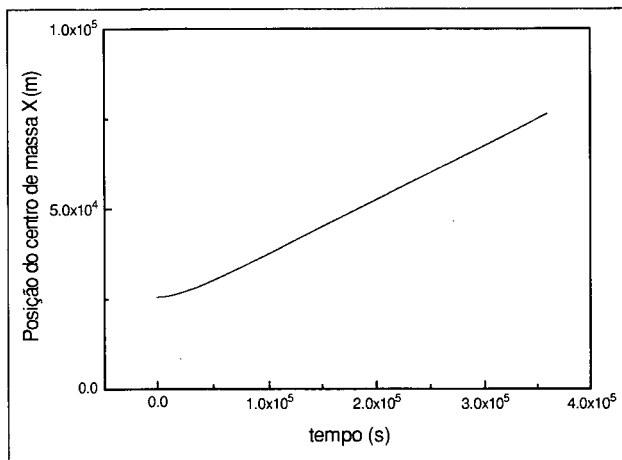
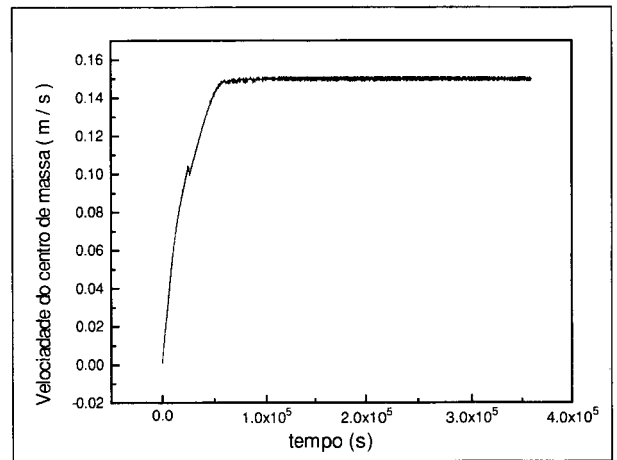


Fig. 5.12: Espessuras para o caso de corrente de água nula e velocidade do vento de 5 m/s.



(a)



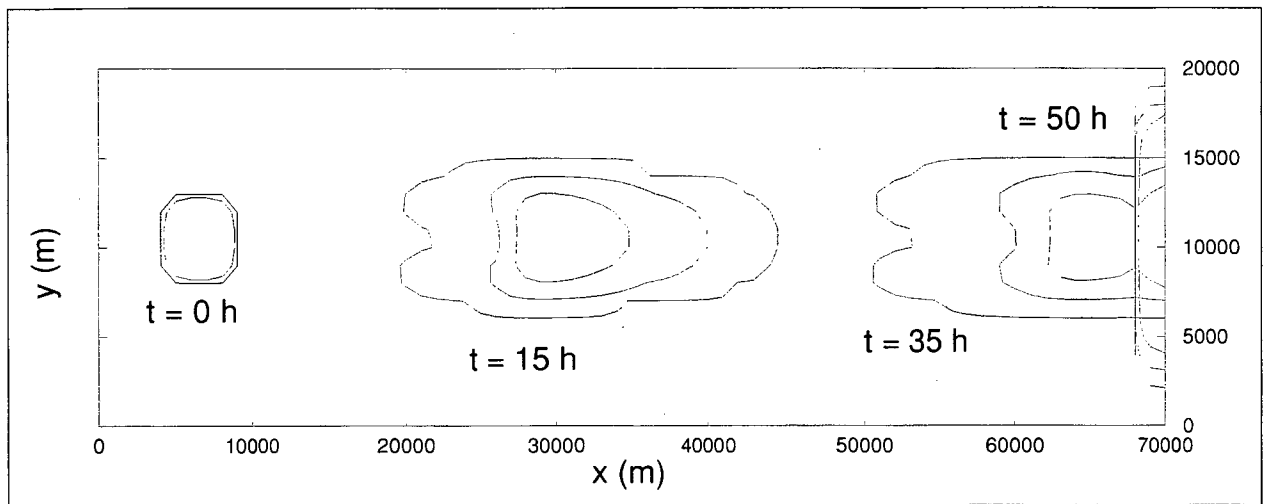
(b)

Fig. 5.13: Deslocamento do centro de massa da mancha de óleo para o caso de corrente de água nula e velocidade do vento de 5 m/s. (a) Posição, (b) Velocidade

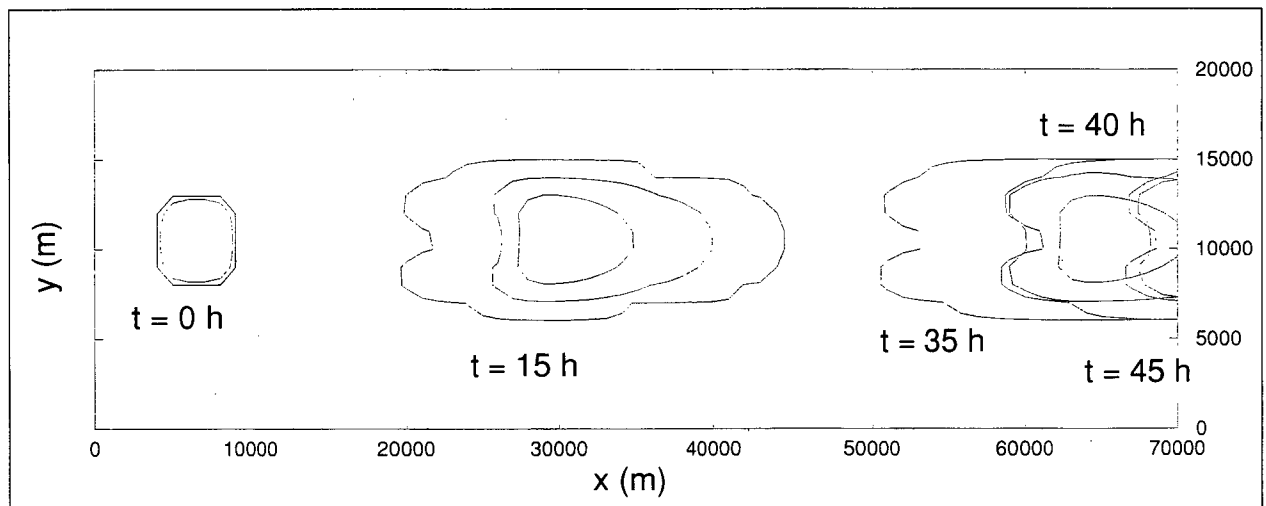
5.3 Espalhamento e transporte 2D

Mostraremos a seguir o espalhamento e arraste de uma mancha originada por um derrame instantâneo, suposta inicialmente circular, considerando um campo de velocidades d'água constante no espaço e no tempo. O objetivo aqui é mostrar o

alongamento da mancha no sentido das correntes e os efeitos dos diferentes tipos de condição de contorno. Na Fig. 5.14 são mostradas as isolinhas de espessura para $h=1\times 10^{-3} m$, $h=1\times 10^{-4} m$ e $h=1\times 10^{-6} m$, para diferentes tempos. Se supõe um derrame instantâneo, inicialmente circular com um raio de $2000 m$ e uma velocidade da corrente d'água constante no espaço e no tempo de $0.5 m/s$ na direção x .



(a)



(b)

Fig. 5.14: Isolinhas de espessura para $h=1\times 10^{-4}$ e $h=1\times 10^{-6}$ para o problema de espalhamento e arraste 2D. (a) fronteira leste impermeável, (b) fronteira leste com saída de massa

Observa-se o alongamento da mancha no sentido da corrente, resultado da composição do espalhamento a o arraste causado pela corrente. As oscilações que se observam na parte posterior da mancha se devem provavelmente a oscilações

numéricas e este fato tem a ver com a forma de avaliar as espessuras nas faces dos volumes, descrita no capítulo anterior.

Também pode-se ver o alargamento da mancha no eixo y dado pelo espalhamento devido à gravidade. Ainda, na Fig. 5.14, se observam os efeitos dos diferentes tipos de condição de contorno. Para o caso de fronteira impermeável (Fig. 5.14 (a)) vemos a acumulação de óleo na fronteira, que devido ao aumento da espessura e, portanto aumento dos gradientes de espessura, começa a escoar no sentido transversal. Para o caso de fronteira com saída de massa (condição localmente parabólica) mostrado na Fig. 5.14 (b), vemos que a condição de contorno não afeta o escoamento a montante, já que a distribuição de massa de óleo é idêntica à da condição de fronteira impermeável enquanto a mancha se encontra dentro do domínio, porém a condição localmente parabólica permite que a mancha abandone o domínio como se a fronteira não existisse. A Fig. 5.15 mostra a massa presente sobre a superfície d'água dentro do domínio de cálculo em função do tempo transcorrido, calculada a partir da Eq. (4.83), para o caso de fronteira impermeável e para o caso de fronteira com saída de massa. Observa-se que para o caso de fronteira impermeável, a massa na superfície se mantém constante, como é de se esperar, já que não existem fontes poluentes e não são considerados mecanismos de transferência de massa como evaporação, floculação, etc.. Para o caso de fronteira com saída de massa, a massa vai abandonando o domínio até anular-se no interior do domínio.

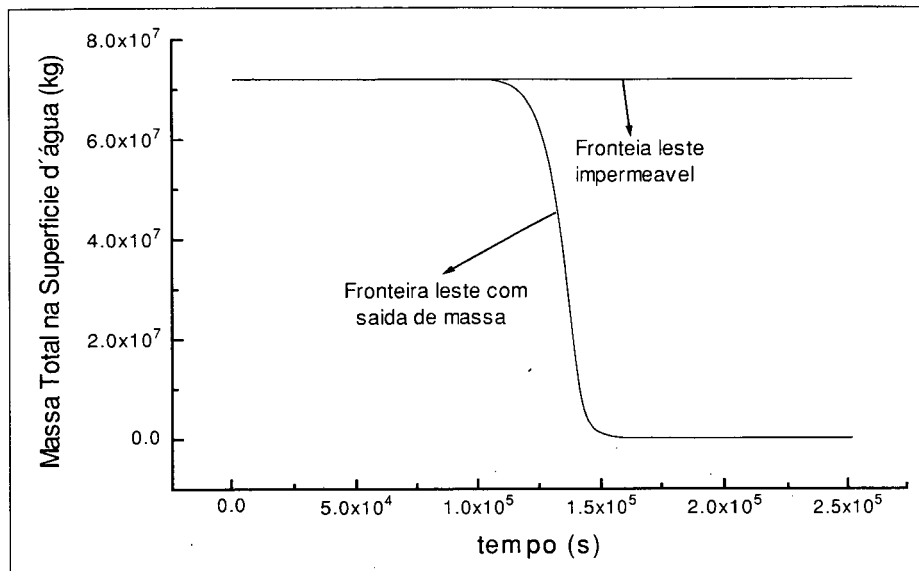


Fig. 5.15: Massa total na superfície d'água para diferentes condições de contorno.

5.4 Simulação de um derrame hipotético no porto de São Francisco do Sul

No porto de São Francisco do Sul, estado de Santa Catarina, existe um ponto de carga e descarga de óleo em alto mar. Uma **monoboia** é colocada na ponta da prolongação de um oleoduto que adentra no mar por 9 quilômetros. Nesse local é colocado um dispositivo de carga e descarga de óleo. Isto evita que os barcos tanque precisem entrar no porto para carregar ou descarregar petróleo. Por outro lado, a ruptura do oleoduto poderia causar grandes derrames devido à alta pressão dentro do encanamento, mesmo que o vazamento seja por pouco tempo. Ou ainda, pequenos a médios derrames poderiam ser causados por falhas em operações de carga e descarga.

Este problema tem como objetivo mostrar a generalidade do código computacional implementado resolvendo um derrame real. O campo de velocidades da água foi considerado constante no espaço e variável no tempo. Existem dados de medições feitas em campo utilizando-se, de dispositivos de fundeio e flutuação e, portanto, são valores reais da corrente que contemplam todas as componentes que contribuem ao movimento das águas, isto é correntes residuais, marés, etc.. Porém, o problema que aqui surge é que estes dados são medidos em um único ponto e

portanto devem ser considerados constantes no espaço. Estes dados serviriam de condições de contorno para modelos de Águas Rasas com os quais se poderia estimar a distribuição espacial de velocidades para ser usada em nosso modelo. Mas como já comentado, não é objetivo deste trabalho realizar estas modelagens e isto é deixado para futuros estudos. Médias periódicas destes dados (fornecidas pelo Laboratório LAHIMAR) ainda não processados (bruto), indicam que as correntes residuais são aproximadamente de 0.02 m/s na direção oeste-leste (u) e 0.04 m/s na direção sul-norte (v). A estes valores devem ser somadas as componentes de maré que em média são aproximadamente de 0.05 m/s para u e 0.15 m/s para v . Devemos esclarecer que estes dados são aproximados, já que para se ter resultados precisos das medições, os dados obtidos em campo deveriam ser processados filtrando-se os ruídos, os picos gerados por tormentas no local, etc.. Porém, como já salientado o objetivo aqui é mostrar a aplicação do modelo para um caso real, e não obter resultados para comprovação experimental, já que mesmo tendo-se valores corretamente processados, estes mostram a variação temporal das correntes em um único local, isto é, desconsiderando a variação espacial das mesmas, perdendo assim toda acurácia no cálculo da distribuição do óleo sobre a superfície d'água. Assim, as velocidades das correntes utilizadas na simulação foram consideradas como:

$$\begin{aligned}
 u(\vec{r}, t) &= 0.05 \sin\left(\frac{2\pi}{12.54 \times 3600} t\right) + 0.02 & \forall \vec{r} \\
 v(\vec{r}, t) &= 0.15 \sin\left(\frac{2\pi}{12.54 \times 3600} t\right) + 0.05 & \forall \vec{r}
 \end{aligned}
 \tag{5.10}$$

isto é, as correntes de maré foram consideradas como variando senoidalmente no tempo com um período de 12.54 h , que corresponde ao primeiro período lunar.

Foram feitas simulações para três tipos de condições do derrame. Primeiro considerou-se um derrame instantâneo no ponto central do oleoduto entre a costa e a monoboia, isto é, o derrame acontece num ponto afastado da costa, e se considerará que não tem vento no local e não existe evaporação. Também foram feitas simulações de um rompimento do oleoduto perto da costa, já que neste caso os efeitos do derrame são mais nocivos do que um derrame em mar aberto, considerando-se os ventos de duas direções, norte-nordeste e sul-sudeste. Os campos de velocidades d'água são

iguais ao primeiro caso e, nestes casos foi considerada a evaporação do óleo. Ventos com componentes do leste, já que este é um dos casos mais nocivos, pelo fato destes ventos arrastarem a mancha para a costa, foram considerados.

Os resultados das simulações serão apresentados através dos campos de espessura do óleo em intervalos temporais¹¹ de $10 h$, plotando as isolinhas de espessura de, $1 \times 10^{-3} m$, $1 \times 10^{-4} m$, $1 \times 10^{-5} m$, e $1 \times 10^{-6} m$. Como já comentado, é considerado que os limites da mancha de óleo se estendem até este último valor de espessura ($1 \times 10^{-6} m$).

O intervalo temporal ($\Delta t = 900 s$) utilizado nas simulações foi escolhido em função da estabilidade do algoritmo, porém deve-se deixar claro que a precisão da solução depende fortemente deste parâmetro pelo fato de ser um problema transiente. Assim, o valor do intervalo temporal deve ser escolhido em função da precisão desejada para a solução transiente.

A seguir se apresentam os resultados para o primeiro caso, na Fig. 5.17, é mostrada a malha utilizada em todas as simulações, a definição das condições de contorno, a posição inicial da mancha de óleo para o primeiro caso e a localização da fonte poluente para os casos de vazamento constante. Na Fig. 5.18 mostrada a evolução espacial e temporal da mancha de óleo para o primeiro caso simulado.

¹¹ Refere-se aos intervalos em que são plotados os campos e espessuras e não ao intervalo temporal usado nas simulações (Δt).

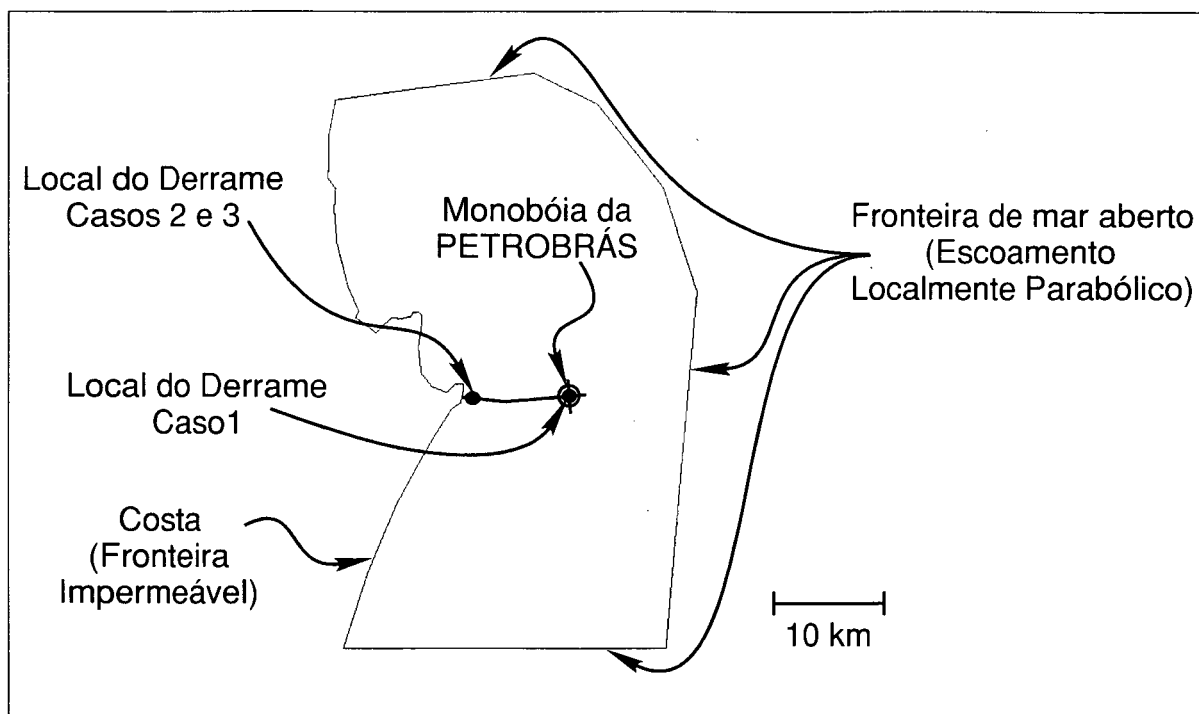


Fig. 5.16: Definição do domínio e Condições de Contorno para as simulações de um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul

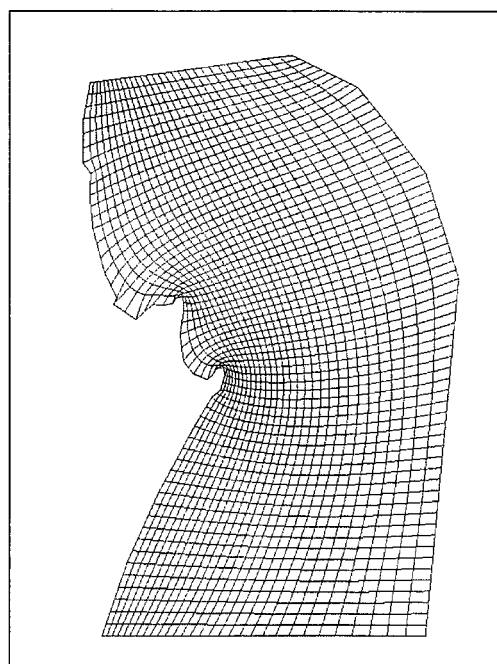
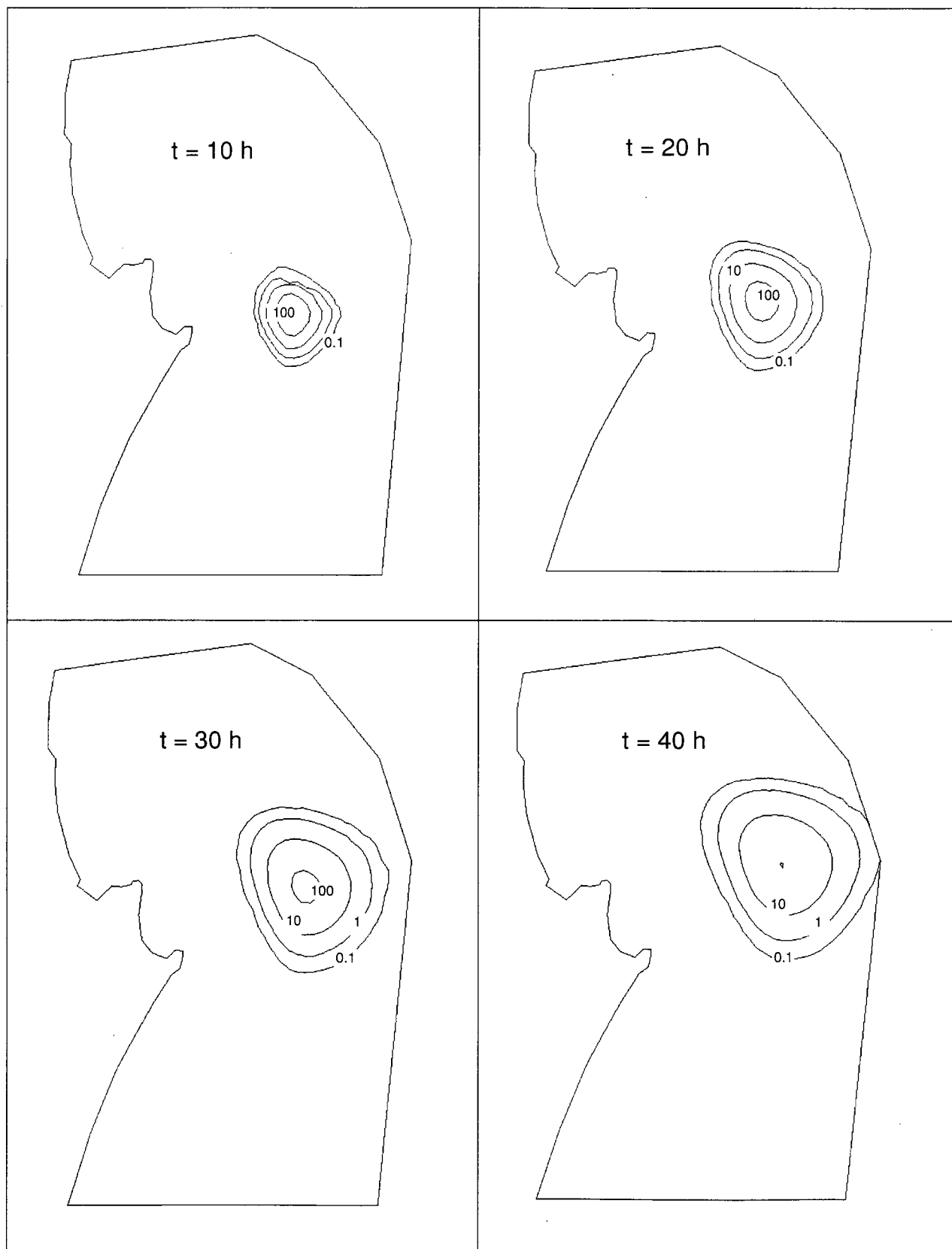


Fig. 5.17: Malha utilizada na simulações de um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul



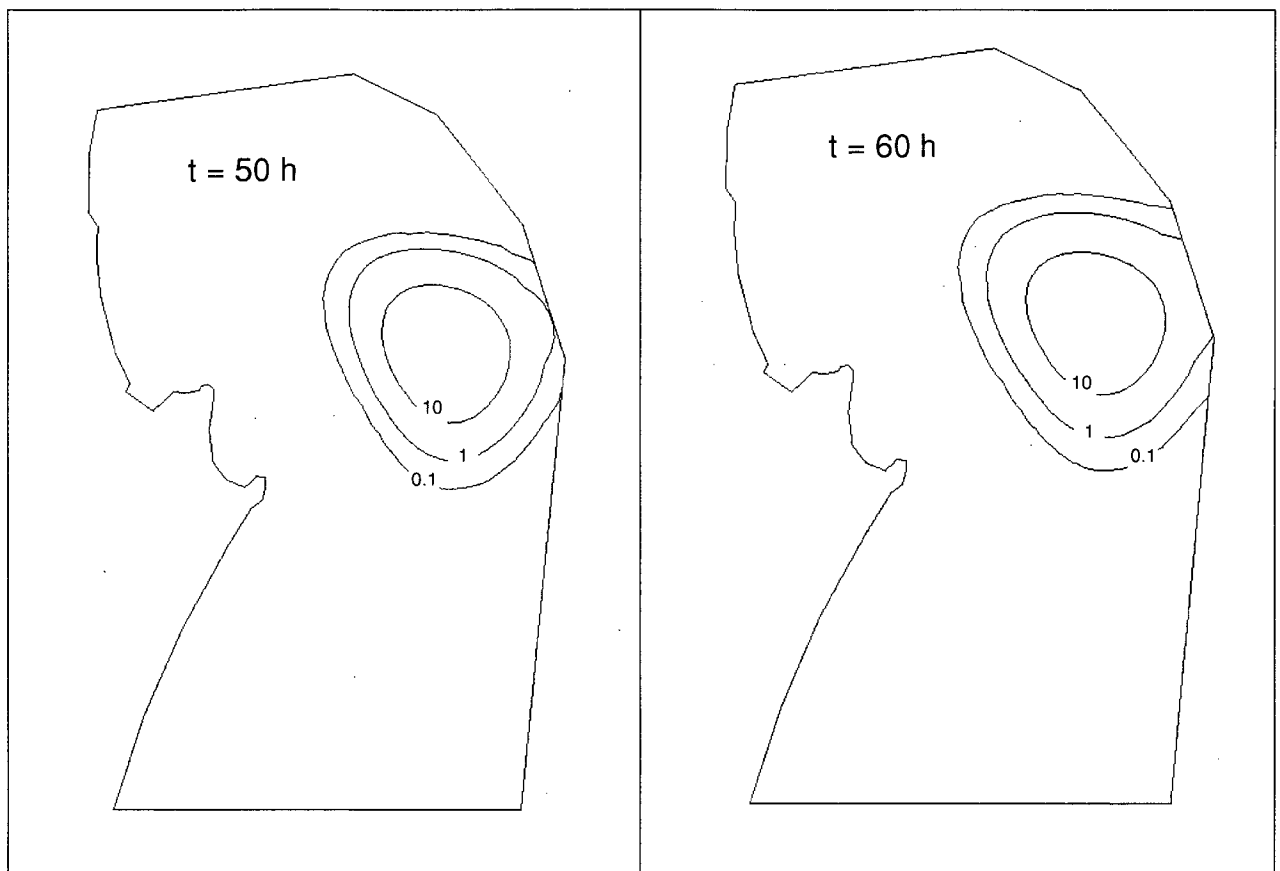
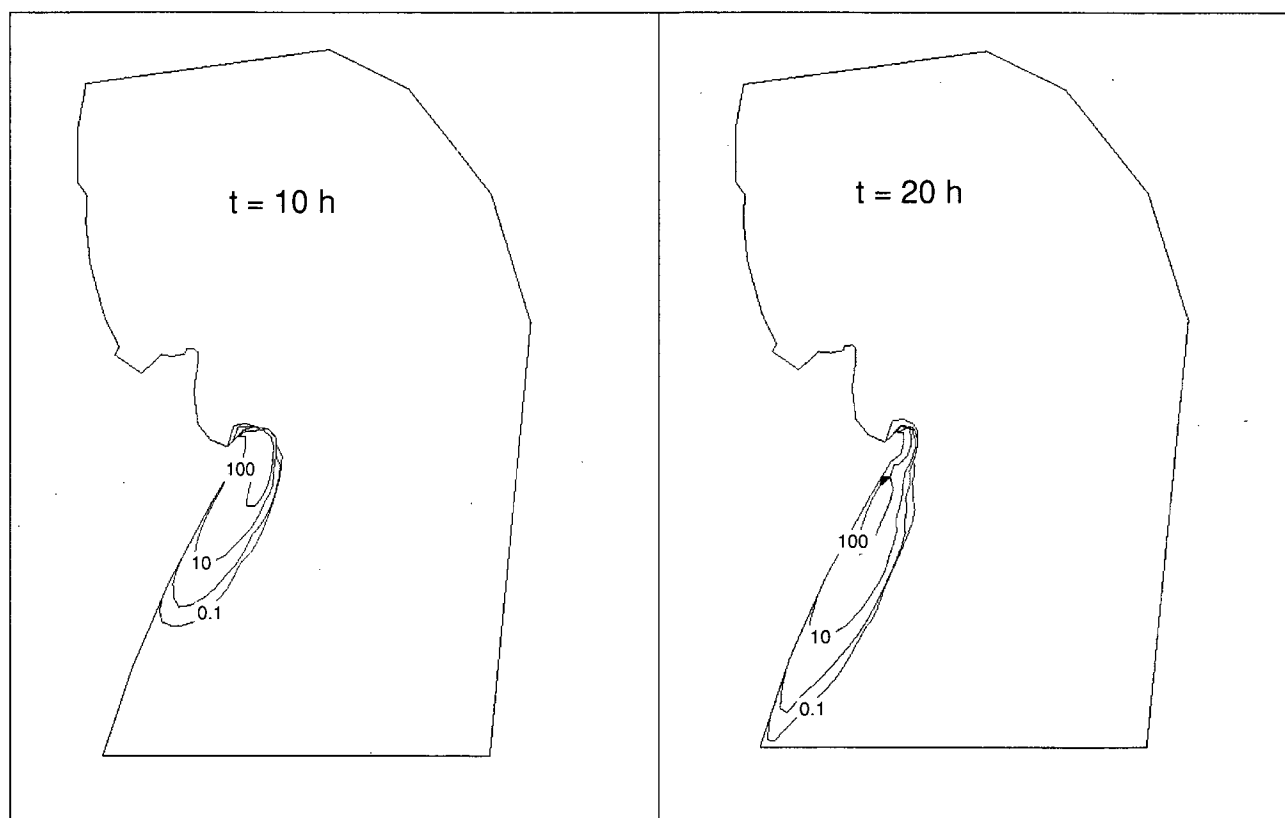


Fig. 5.18: Campos de espessura ($\times 10^{-4} m$) para um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul. (caso 1).

Pelo fato das correntes oscilarem paralelamente à costa, por causa das componentes de maré, pode-se observar pela forma da mancha que o centro de massa não sofre grandes deslocamentos, movimentando-se levemente em direção norte-nordeste por causa das correntes residuais.

Para a segunda simulação, se considera um rompimento de oleoduto perto da costa. Para simular o rompimento do oleoduto utilizou-se uma fonte poluente localizada a 1 km. da costa, na linha do oleoduto, injetando $1000 kg/s$ durante $10 h$. Se considera o vento constante no espaço e no tempo, em direção norte-nordeste de $36 km/h (10 m/s)$. Os derrames em regiões costeiras são os mais nocivos para o ambiente. Nestes casos é quando maior necessidade se tem de um modelo para o cálculo do campo de velocidades d'água, já que este é fortemente modificado pelas geografias costeiras. Quando o derrame se dá em alto mar, o erro ao se considerar o campo de corrente espacialmente constante é menos significativo.

A Fig. 5.19 mostra a evolução espaço-temporal do campo de espessuras de óleo para o caso descrito acima. Se observa o forte alongamento da mancha na direção do vento. O vento está empurrando a mancha contra a costa que, por sua vez, atua como barreira (condição de fronteira impermeável) restringindo assim o espalhamento transversal. Como já comentado, nos casos em que o vento é do mar, um derrame em região costeira se torna ainda mais nocivo já que o óleo se espalha ao longo da costa, afetando grandes extensões de praias.



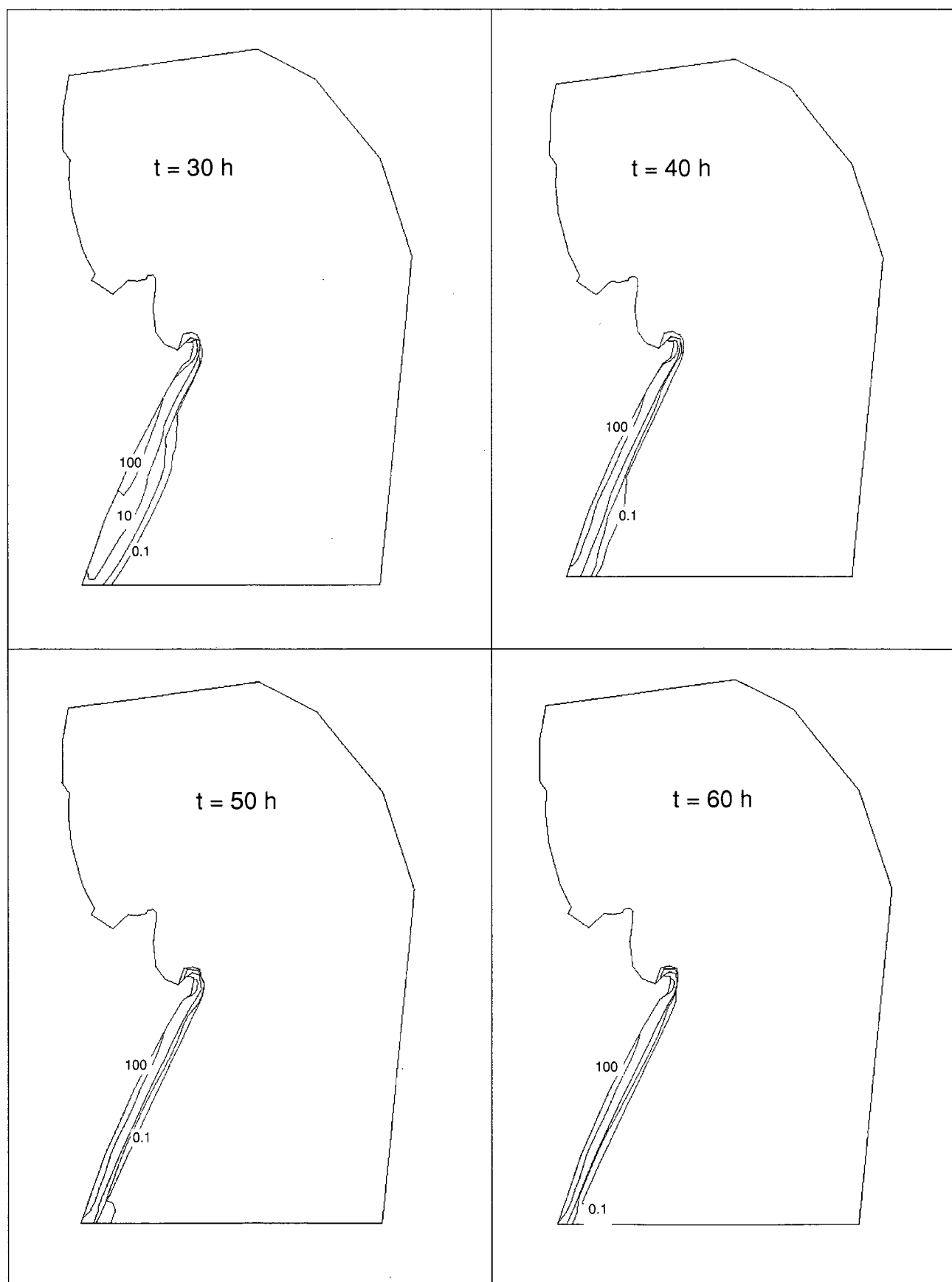
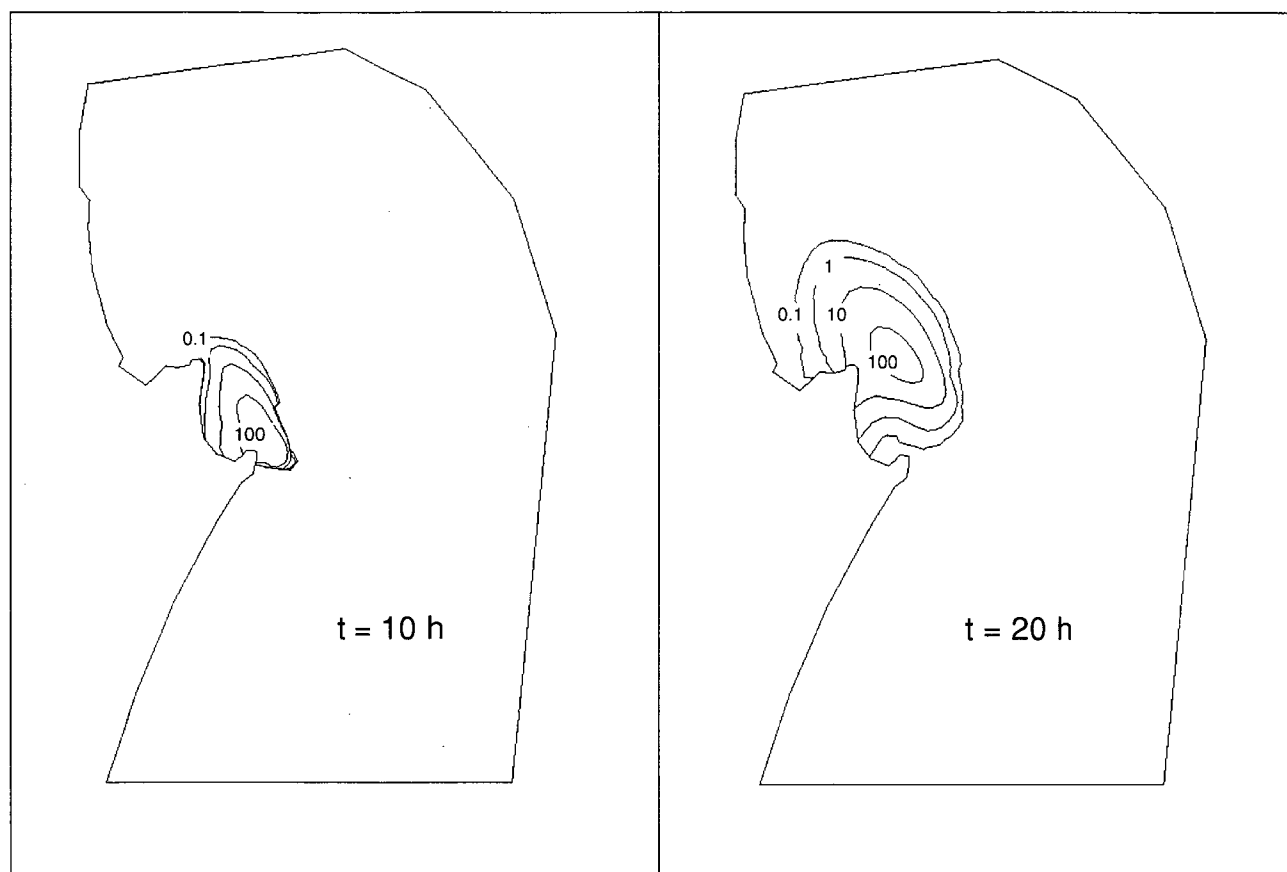


Fig. 5.19: Campos de espessura ($\times 10^{-4} \text{ m}$) para um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul. (caso 2).

Por último foi resolvido um caso com parâmetros idênticos ao caso anterior porém considerando o vento do sudeste a 36 km/h (10 m/s). Neste caso o ângulo de incidência entre o vento e a costa é menor, permitindo o espalhamento transversal¹² da mancha. Lembremos também que as correntes correm em direção sul-sudoeste – norte-nordeste, as quais tendem a alongar a mancha nesta direção. No caso anterior, as correntes e os ventos tinham aproximadamente a mesma direção e portanto a mancha tende a se alongar sempre paralelamente à costa.



¹² Refere-se à direção transversal ao movimento principal da mancha, que é a direção do vento.

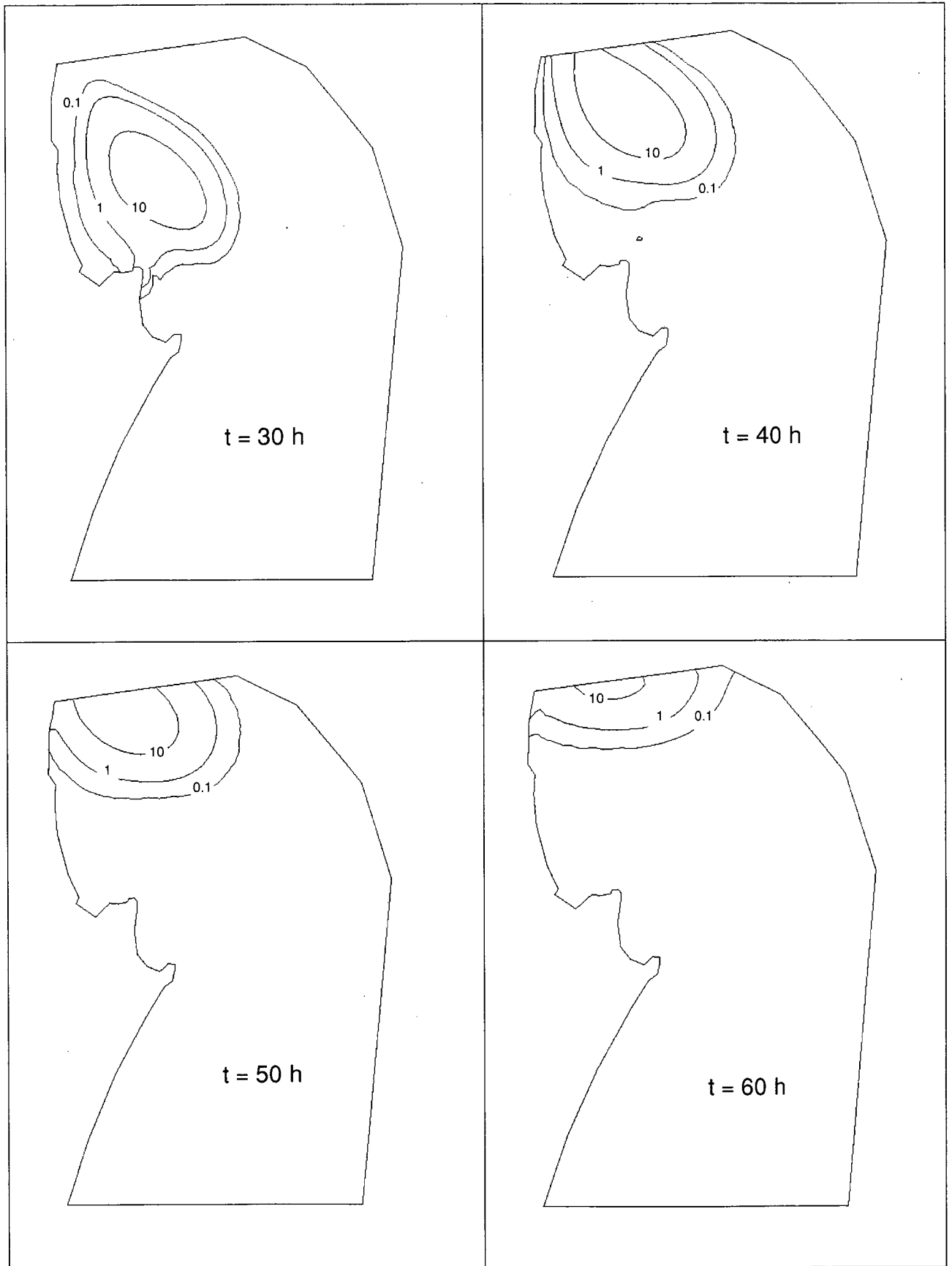


Fig. 5.20: Campos de espessura ($\times 10^{-4} \text{ m}$) para um eventual derrame no porto de São Francisco do Sul. (caso 3).

Observamos que a mancha tende a se alongar na direção sul-norte, porém neste caso existe um importante alargamento na direção oeste-leste. Como explicado acima, isto se deve em parte ao espalhamento dado pela força de gravidade, e em parte às correntes residuais que possuem uma componente oeste-leste e o vento tem um componente em direção leste-oeste. Estes dois efeitos tendem a alargar a mancha, o vento empurrando-a contra a costa e as correntes residuais puxando-a mar adentro.

6. Conclusões e Sugestões

O trabalho apresentado teve como objetivos fundamentais estudar os processos físicos e hidrodinâmicos que acontecem em um derrame de petróleo no mar; e criar uma metodologia para análise de trajetória deste derrame, visando a possibilidade do desenvolvimento de uma ferramenta computacional para utilização em engenharia ambiental. Para alcançar estes objetivos foi, primeiramente, apresentado um estudo dos fenômenos físicos que estão presentes em um derrame de petróleo. Em seguida, baseando-se neste estudo foi proposto um modelo matemático baseado nas equações da conservação da massa e quantidade de movimento.

O modelo matemático foi obtido através da integração, na direção vertical, das equações de conservação da massa e quantidade de movimento. Neste modelo, nenhum termo das equações foi desconsiderado, e apenas foram feitas hipóteses simplificativas¹³ para realizar a integração na direção vertical das equações de forma a tornar o modelo bi-dimensional. Um tratamento tridimensional do problema não traria maior acurácia nos resultados complicando excessivamente a resolução numérica do problema. Com a idéia de criar uma ferramenta computacional de fácil utilização em engenharia, a resolução numérica deveria requerer o menor custo computacional possível. O modelo matemático aqui proposto, considera os processos de espalhamento nas duas primeiras etapas, segundo a classificação proposta por Fay (1969) e o transporte do óleo causado pela correntes e ventos. Também, foi considerada a evaporação do óleo devido a grande transferência de massa que esta produz, podendo modificar a trajetória da mancha de óleo.

Dada a similaridade das equações governantes obtidas, foi proposta uma metodologia numérica de resolução das equações a partir de modificações na metodologia apresentada por Casulli e Cheng (1992) para a resolução de escoamentos em águas rasas. Estas modificações consistem em estender a

metodologia proposta naquele trabalho, inicialmente utilizando Diferenças Finitas e malhas cartesianas, para uma metodologia conservativa (Volumes Finitos) e utilizando coordenadas curvilíneas generalizadas. Desta forma, o modelo é aplicável a geometrias irregulares como as que aparecem em regiões costeiras. Uma grande vantagem desta metodologia é o avanço temporal semi-implícito, isto é, os campos de velocidades são obtidos em forma explícita e o campo de espessuras¹⁴ da lâmina de óleo em forma implícita. Este fato confere robustez ao método, já que cria um acoplamento suficientemente forte entre pressão (espessura) e velocidade, com baixo custo computacional, o que é procurado visando à criação de uma ferramenta utilizável em engenharia.

A verificação do modelo foi feita através da comparação dos resultados obtidos para o problema do espalhamento axi-simétrico com as soluções apresentadas por Fay (1971). Mesmo não se dispondo de soluções comparativas para problemas com movimento do corpo d'água que suporta a lâmina de óleo, as tendências físicas dos resultados para estes casos foram as esperadas. Também foram feitas simulações de derrames reais no porto de São Francisco do Sul para mostrar as potencialidades da metodologia apresentada.

Algumas sugestões para futuras pesquisas, foram propostas ao longo do trabalho, mas iremos resumir aqui as de maior importância.

Estudos numéricos feitos nos levam a concluir que as tensões cisalhantes internas do óleo podem ser desprezadas sem perder precisão nos resultados e com a conseqüente redução do custo computacional de resolução do modelo. Do ponto de vista numérico, isto implicaria na utilização de uma função de interpolação que garanta estabilidade em problemas não viscosos. É sugerido continuar a utilizar a metodologia semi-implícita proposta por Casulli e Cheng (1992).

Finalmente, poderiam ser acoplados, além da evaporação outros modelos de transferência de massa para considerar fenômenos como floculação, diluição, etc.. Isto

¹³ Estas hipóteses são descritas em forma detalhada no capítulo 4.

¹⁴ Lembremos que, por considerarmos apenas a pressão hidrostática, o campo de pressão é proporcional ao campo de espessuras.

não será de difícil implementação no código já que todos estes fenômenos podem ser acoplados ao modelo através de correlações similares à utilizada para a evaporação.

7. Referências Bibliográficas

1. ASCE (1996) Task Committee on Modeling Oil Spills of the Water Resources Engineering Division (1996) "*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.
2. Beer, T., Humphries R. B., Bouwhuis R. (1983) "*Modelling Nearshore Oil Slick trajectories*", Marine Pollution Bulletin, Vol. 14, No. 4, pp. 141-144.
3. Bejan, A. (1995) "*Convection Heat Transfer*", John Wiley & Sons.
4. Benqué, J. P., Hauguel, A., and Viollet, P. L. (1982) "*Engineering Application of Computational Hydraulics*", II, Pitman Advanced Publishing Program, London, pp. 57-63.
5. Borthwick e Joynes (1992) "*Laboratory Study of Oil Slick Subjected to Nearshore Circulation*", Journal of Environmental Engineering, Vol. 118, No 6, pp. 905-922.
6. Bortolon (1997) "*Simulação transiente das equações de águas rasas pelo método dos volumes finitos*", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.
7. Buckmaster (1973) "*Viscous-Gravity spreading of an oil slick*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 59, No. 3, pp. 481 – 491.
8. Casulli V. and Cheng R. T. (1992) "*Semi-Implicit Finite Difference Methods for Three Dimensional Shallow Water Flow*", International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 15, pp. 629-648.
9. Chow, V. T. (1973) "*Open Channels Hydraulics*", McGraw-Hill, New York.
10. Cuesta, I., Grau, F. X., Giralt, F. (1990) "*Numerical Simulation of Oil Spills in a Generalized Domain*", Oil and Chemical Pollution, 7, pp. 143 – 159.

11. DiPietro, N. D., Huh, C., Cox, R. G. (1978) "*The Hydrodynamics of the Spreading of One Liquid in the Surface of Another*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 81, Part 3, pp. 529 – 549.
12. Doerffer, J. W. (1992) "*Oil Spill Response in the Marine Environment*", Pergamon Press.
13. Elliott, A. J. (1991) "*EUROSPILL: Oceanographic Processes and NW European Shelf Databases*", Marine Pollution Bulletin, Vol. 22, No.11, pp. 548 – 553.
14. Fannelop, T. K, Waldman, G. D. (1971), "*Dynamics of Oil Slicks*", AIAA Journal, Vol. 10, No. 4, pp. 506 – 510.
15. Fay, J. A. (1969), "*The spread of oil slicks on a calm sea*", Oil on the sea Plenum, New York, pp. 53 – 64.
16. Fay, J. A. (1971) "*Physical Processes in the Spread of Oil on a Water Surface*", Proceedings of the Joint Conference on Prevention and Control of Oil Spills, American Petroleum Institute, Washington D. C., pp 463-467.
17. Fingas e Sydor (1980) "*Development of an Oil Spill model for the St. Lawrence River*", Tech. Bulletin No. 116, Environment Canada, Ottawa, 25 pp..
18. Foda, M. e Cox, R. G., (1980), "*The Spreading o a Thin Liquid Films on a Water-Air Interface*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 101, Part 1, pp. 33 – 51.
19. Hess, K. W. and Kerr, C. L. (1979) "*A Model to Forecast the Motion of Oil on the Sea*", Proceedings of the Oil Spill Conference, pp 653-663.
20. Hoult, D. P. (1972). "*Oil Spreading on the Sea*", Annual Review of Fluid Mechanics, pp. 341 – 367.
21. Kirillin, V. A., Sichev, V. V., Sheindlin, A. E. (1976) "*Termodinámica Técnica*", Ed. MIR, Moscú.
22. Kundu, P. K. (1990) "*Fluid Mechanics*", Academic Press.

23. Mackay, D., Buist, I., Mascarenas, R. e Paterson, S. (1980), "*Oil Spill Processes and Models*", Report EE-8 of Environment Canada Research and Development Division, Ottawa, Ontario.
24. Maliska C. R. (1981) "*A Solution Method for Three-Dimensional Parabolic Fluid Problems in Nonorthogonal Coordinates*", PhD. Thesis, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.
25. Maliska C. R. a Raithby, G. D. (1984) "*A Method for Computing Three-Dimensional Flows Using Boundary-Fitted Coordinates*", International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 4, pp. 519-537.
26. Maliska, C. R. (1995), "*Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*" Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
27. Marchi e Maliska (1994) "*A Non-orthogonal Finite Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-located Variables*", Numerical Heat Transfer, Vol. 26, No. 3, pp. 293-311.
28. Meyer, J. F. C. A., Cantão, R. F., Poffo, I. R. F. (1998) "*Oil Spill Movement in Coastal Sea: Modelling and Numerical Simulations*", Oil and Hydrocarbon Spills, Modelling, Analysis and Control, Computational Mechanics Publications, pp. 23-32.
29. Patankar, S. V. e Spalding, D. B. (1972) "*A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows*", Int. Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 15, pp 1787-1806.
30. Patankar, S. V (1980) "*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*", Hemisphere Publishing Corporation.
31. Raithby, G. D., Torrance, K. E. (1974) "*Upstream-Weighted Differencing Schemes and Their Applications to Elliptic Problems Involving Fluid Flow*", Computers & Fluids, Vol. 2, pp. 191 – 206.
32. Shen, H. T. e Yapa, P. D. (1988) "*Oil Slick Transport in Rivers*", Journal of Hydraulic Engineering, Vol. 114, N^o 5, pp 529-543.

-
33. Stelling, G. S., Wang, L. X. (1984) "*Experiments and Computations on Unsteady Separating Flows in An expanding Flume*", Relatório No. 2, Delft University of Technology, Delft, The Netherlands.
 34. Stiver, W. & Mackay, D. (1984) "*Evaporation Rate of Spills of Hydrocarbons and Petroleum Mixtures*", *Envir. Sci. Technol*, Vol. 18, pp 834-840.
 35. Stiver, W., Shiu, W. Y., Mackay, D. (1989) "*Evaporation Times and Rates of Specific Hydrocarbons in Oil spills*", *Environment Science Technology*, Vol. 23, No. 1, pp. 101-105.
 36. Stolzenbach, K. D., Madsen, O. S., Adams, E. E., Pollack, A. M., Cooper, C. K. (1977) "*A Review of the Basic Techniques for Predicting the behavior of surface Oil Slicks*", Rep. No. 122, Dept. of Civil Engineering, MIT, Cambridge, Massachusetts.
 37. Venkatesh (1988) "*The Oil Spill Behavior Model of the Canadian Atmospheric Environment Service*", Part 1, *ATMOSPHERE-OCEAN*, Vol. 26, pp 93-108.
-