

ALGORITMO ADAPTATIVO APLICADO À
MODELAGEM DE TRANSPORTE DE ÓLEO

Nicole Mehdi

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE
MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL

Aprovada por:

Prof. Luiz Landau, D.Sc.

Prof. Elson Magalhães Toledo, D.Sc.

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Marcos Antonio dos Santos Fernandez, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2005

MEHDI, NICOLE

Algoritmo Adaptativo Aplicado
à Modelagem de Transporte de Óleo

[Rio de Janeiro] 2005

X, 29,7 cm (COPPE/UFRJ,
M.Sc., Engenharia Civil, 2005)

Tese – Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

1. Transporte de óleo no mar
2. Modelagem numérica
3. Algoritmo adaptativo

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

“Espero que vocês saiam e deixem que as histórias lhes aconteçam,
que vocês as elaborem, que as reguem com seu sangue,
suas lágrimas e seu sorriso até que elas floresçam,
até que você mesma esteja em flor.
Então, você será capaz de ver os bálsamos que elas criam,
bem como onde e quando aplicá-los.
É essa a missão. A única missão.”

Mulheres que correm com os lobos,
Clarissa Pinkola Estés

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos que fizeram parte desta etapa da minha vida.

Ao meu orientador Audalio (Obrigada! Foram muitos os aprendizados!),
ao meu orientador Landau (Obrigada pelo apoio!),
ao Ricardo Marcelo (Obrigada pela amizade e pela ajuda, você é uma pessoa rara!),
à Rita Sena (Obrigada pela amizade e apoio moral nas horas difíceis!),
à equipe que hoje é o LAMMA,
ao Departamento de Meteorologia, e
ao LAMCE.

À Yolanda e a Adriana (Obrigada! Muito!).

Ao Litos (Obrigada pela ajuda, pela parceria, pela construção, enfim, por fazer parte!).

À Sassá, mãe, pai, Bina, Chris, Zia, Theo, Família Zipi e Hashi (Vocês sabem...!).

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

ALGORITMO ADAPTATIVO APLICADO À
MODELAGEM DE TRANSPORTE DE ÓLEO

Nicole Mehdi

Março/2005

Orientador: Luiz Landau

Programa: Engenharia Civil

Um algoritmo adaptativo foi desenvolvido e implementado em um modelo computacional de transporte de óleo no mar. Para analisar o desempenho do algoritmo, três simulações de um vazamento de óleo na região da Bacia de Campos (RJ) foram realizadas utilizando grade de baixa resolução, grade de alta resolução e grade adaptativa. A análise comparativa entre as simulações foi bastante satisfatória e indicou que o algoritmo adaptativo desenvolvido além de ser mais econômico do ponto de vista de custo computacional (da ordem de 4.000 vezes mais rápido, considerando a escala espaço-temporal do experimento), é capaz de prover resultados semelhantes, no que se refere à conservação de massa da mancha de óleo durante a integração, aos de uma modelagem de transporte com aplicação de uma grade de alta resolução cobrindo todo o domínio espacial.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

ADAPTIVE ALGORITHM APPLIED TO
OIL TRANSPORT MODELLING

Nicole Mehdi

March/2005

Advisor: Luiz Landau

Department: Civil Engineering

An adaptive algorithm was developed and applied on a computational model for oil drift on the sea. To analyze the algorithm performance, three simulations of an oil spill on Campos Basin (RJ) were performed applying coarse, high resolution and adaptive grids, respectively. A comparative analysis between these simulations revealed that the adaptive algorithm was more economic (computational aspect) than the other two simulations (of the order of 4.000 times faster, considering the space-time scale of the experiment). The algorithm was able to produce similar results related to mass conservation of the oil slick during the integration when compared to the high resolution grid solution.

ÍNDICE DO TEXTO

1. Introdução.....	1
2. Modelagem de transporte de constituintes	5
2.1. Abordagem Euleriana.....	8
2.2. Abordagem Lagrangeana.....	9
2.3. Aplicações na indústria do petróleo.....	10
3. Metodologia.....	14
3.1. O Modelo NICOIL.....	14
3.2. Sistema de grade adaptativa em modelagem numérica.....	16
3.2.1. Método AMR – Adaptive Mesh Refinement	16
3.2.2. Método adaptativo para modelagem de transporte de óleo no mar	20
3.2.2.1. Características das sub-grades	22
3.2.2.2. Interpolação dos dados	23
3.2.2.2.1. Dados de espessura do óleo.....	23
3.2.2.2.2. Dados de velocidade de corrente.....	24
3.2.2.3. Integração, procedimento de adaptação de grade e transporte	25
3.2.2.4. Experimento realizado para a definição do número de pontos utilizados na discretização de uma mancha de óleo.....	28
3.3. Campo de correntes a ser utilizado no experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo de transporte de óleo NICOIL	34
4. Experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo de transporte de óleo NICOIL	37
4.1. Simulação I - Modelagem de transporte com grade de baixa resolução (grade base).....	38
4.2. Simulação II - Modelagem de transporte com grade de alta resolução (grade fina).....	42
4.3. Simulação III - Modelagem de transporte com o algoritmo de grade adaptativa.....	46

5. Discussão	53
6. Conclusões.....	59
7. Referências Bibliográficas.....	61
Apêndice A. Esquemas numéricos utilizados no modelo de transporte NICOIL	64
Apêndice B. Formulações paramétricas dos processos de decaimento de óleo considerados pelo modelo de transporte NICOIL	66
Apêndice C. <i>Princeton Ocean Model</i> (POM)	69
Apêndice D. Figuras referentes ao transporte em cada uma das sub-grades adaptadas no decorrer da simulação referente à modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa (Simulação III).	71

ÍNDICE DE FIGURAS E TABELAS

Figura 2.1. Esquema do balanço de massa de constituinte na direção x.	5
Figura 3.2.1.1. Sequência de grades aninhadas (Figura adaptada de BLAYO & DEBREU, 1999).	18
Figura 3.2.2.2.2.1. Um segmento de reta unindo dois pontos entre os quais deseja-se realizar interpolação linear.	24
Figura 3.2.2.4.1. Distribuição inicial de espessura.	29
Figura 3.2.2.4.2. Campo de velocidade hipotético.	30
Figura 3.2.2.4.3. Variação de massa da mancha de óleo x Número de pontos discretos	32
Figura 3.2.2.4.4. Ajuste da curva exponencial aos resultados do experimento.	32
Figura 3.2.2.5.1. Campo hidrodinâmico (m/s).	35
Figura 3.2.2.5.2. Campo de divergência (s^{-1}).	36
Figura 4.1.1. Modelagem de transporte de óleo com grade base	39
Figura 4.1.2. Modelagem de transporte de óleo com grade base – Detalhe.	40
Figura 4.1.3. Modelagem de transporte de óleo com grade base – Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.	41
Figura 4.2.1. Modelagem de transporte de óleo com grade fina	43
Figura 4.2.2. Modelagem de transporte de óleo com grade fina – Detalhe.	44
Figura 4.2.3. Modelagem de transporte de óleo com grade fina – Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.	45
Figura 4.3.1. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa.	47
Figura 4.3.2. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Detalhe.	48
Tabela 4.3.1. Informações básicas das sub-grades adaptadas durante a simulação III. ..	50
Figura 4.3.3. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.	51
Figura 4.3.4. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Tempo de processamento.	52
Figura 5.1. Simulações I (grade base), II (grade fina) e III (grade adaptativa) – Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.	55
Figura D.1. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 1.	71
Figura D.2. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 2.	72

Figura D.3. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 3.....	73
Figura D.4. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 4.....	74
Figura D.5. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 5.....	75
Figura D.6. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 6.....	76
Figura D.7. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 7.....	77
Figura D.8. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 8.....	78
Figura D.9. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 9.....	79
Figura D.10. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 10..	80
Figura D.11. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 11..	81
Figura D.12. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 12..	82
Figura D.13. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 13..	83

1. Introdução

O interesse em possíveis impactos causados por derramamentos de óleo no meio marinho tem levado ao desenvolvimento de modelos computacionais capazes de simular o transporte de manchas de óleo na superfície da água.

Derramamentos e vazamentos de óleo são consequências indesejáveis da produção e transporte de petróleo e refinados. Apesar da maioria dos acidentes ser de pequeno porte, alguns são grandes o bastante para causar sérios impactos ao meio ambiente.

Para que haja eficiência no controle e contenção do óleo à deriva no meio marinho, é necessário que a equipe responsável tenha acesso a informações a respeito da trajetória esperada de determinado tipo de óleo derramado na região atingida.

Este tipo de informação pode ser obtida através da utilização da dinâmica de fluidos computacional, que é considerada uma metodologia importante para a realização de estudos hidrodinâmicos, e conseqüentemente, de transporte de constituintes. Esta metodologia é capaz de diagnosticar e prognosticar o comportamento de fluidos em resposta às forças atuantes no meio, através da solução numérica das equações que governam os processos envolvidos.

É importante ressaltar que para a obtenção de bons resultados nas previsões com modelos computacionais, informações como a qualidade do óleo, quantidade (volume derramado), tempo de vazamento, e o conhecimento da região atingida do ponto de vista meteorológico e oceanográfico, são fundamentais.

Nas últimas décadas, pesquisadores vêm estudando os processos de transporte e comportamento de manchas de óleo em corpos d'água com base nos métodos de trajetória e de balanço de massa, e vários modelos vêm sendo desenvolvidos (SHEN *et al.*, 1987; COZOIL (REED & KNAUSS, 1988); OILMAP (HOWLETT *et al.*, 1993, *apud* CHAO *et al.*, 2001); ADIOS (LEHR *et al.*, 2002); GULFSPILL (AL-RABEH *et al.*, 2000); MOTHY (DANIEL, 1996); GNOME (GNOME, 2002); MOSM (TKALICH, 1999, *apud* TKALICH, 2003); NICOIL (LIMA *et al.*, 2001); CHAO *et al.*, 2001).

Alguns destes modelos encontrados na literatura baseiam-se na abordagem lagrangeana, e outros na abordagem euleriana para o estudo da trajetória do óleo no ambiente marinho. Segundo TKALICH *et al.* (2003), há uma tendência do método

euleriano vir a ser cada vez mais utilizado neste tipo de modelagem, devido ao aumento da necessidade de se acoplar o transporte de poluentes e equações de decaimento de óleo com modelos hidrodinâmicos eulerianos. Segundo os autores, a utilização de técnicas similares para resolver a hidrodinâmica e o transporte, tendem a aumentar a acurácia dos resultados do estudo.

Este trabalho tem por objetivo o desenvolvimento de um algoritmo de grade adaptativa para implementação no modelo euleriano de transporte de óleo NICOIL (LIMA *et al.*, 2001), desenvolvido pelo Laboratório de Modelagem de Processos Marinhos e Atmosféricos (LAMMA) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ).

O enfoque deste trabalho foi o estudo e desenvolvimento de um método adaptativo específico para modelagem de transporte, que apresenta algumas similaridades em relação ao método AMR (*Adaptive Mesh Refinement*) desenvolvido por BERGER & OLIGER (1984), que serão apresentadas e comentadas no capítulo 3, seção 3.2.2.

Em modelagem numérica, o problema de resolução espacial é de significativa importância. Em termos de circulação oceânica e atmosférica, por exemplo, as escalas características dos movimentos (espaciais e/ou temporais) são tão diversas que o custo computacional pode vir a ser um fator limitante.

O interesse em simular determinados processos e/ou fenômenos pode levar à necessidade de se utilizar grades de maior resolução em determinadas regiões do domínio discreto. Nesses modelos de circulação, em sua maioria de grades estruturadas, refinamentos geralmente são realizados utilizando-se grades aninhadas, ou seja, grades fixas no tempo e no espaço, de alta resolução, inseridas em grades de baixa resolução espacial.

Outra alternativa para a realização de refinamentos consiste na utilização de grades adaptativas, grades que se adaptam à variação de escala do fenômeno de interesse e que acompanham a solução no espaço e no tempo.

Em modelagem de transporte de óleo no mar, o problema de resolução espacial também é bastante importante. A grade utilizada para simular a trajetória de uma mancha de óleo deve apresentar uma resolução adequada à representação desta mancha, o que no caso de pequenos vazamentos, pode tornar o custo computacional muito alto.

A utilização de um método de adaptação de grade surge, nesse contexto, como uma alternativa para monitorar a dispersão de uma mancha de óleo com relação à sua variação de dimensão e de posicionamento no tempo durante a simulação numérica.

A idéia básica dos métodos de grade adaptativa é alcançar uma boa resolução espacial com um mínimo de esforço computacional, ajustando localmente a resolução numérica seguindo critério matemático e/ou físico, e, portanto, criando grades refinadas ou removendo grades já existentes, quando e onde necessário (BLAYO & DEBREU, 2002).

A utilização de resoluções espaciais diferentes de acordo com as regiões do domínio, e seu eventual deslocamento com as feições de interesse, consiste em uma tentativa não só de reduzir o custo computacional, como também de preservar a qualidade da solução numérica.

Métodos adaptativos eram aplicados na década de 70 em alguns problemas clássicos de análise numérica.

Um estudo de Joseph Oliger em 1979 sobre métodos de aproximação para solução de problemas de circulação oceânica e atmosférica, serviu de motivação para a elaboração do método AMR por BERGER & OLIGER (1984), um método adaptativo de diferenças finitas para a solução de sistemas de equações diferenciais parciais.

No trabalho dos autores Berger & Oliger, foi apresentado o primeiro algoritmo adaptativo aplicável a problemas bidimensionais que permitia a geração de um número qualquer de grades e de níveis. Tratava-se de um algoritmo bastante geral, que não se restringia à números e tipos de regiões irregulares, nem à direção do movimento.

Aperfeiçoamentos no método AMR foram apresentados por BERGER & COLELLA (1989), e aplicações em problemas tridimensionais foram implementadas por BELL *et al.* (1994).

A partir daí, alguns pesquisadores começaram a utilizar o método adaptativo AMR para a aplicação em estudos de previsão numérica do tempo, como por exemplo SKAMAROCK *et al.* (1989, *apud* BLAYO & DEBREU, 1999), e SKAMAROCK & KLEMP (1993, *apud* BLAYO & DEBREU, 1999).

Outros pesquisadores examinaram a sua aplicação em grades estruturadas no contexto da modelagem oceânica, como BLAYO & DEBREU (1999), DEBREU (2000), BLAYO & DEBREU (2002), e HERRNSTEIN *et al.* (2004).

Este trabalho encontra-se organizado da seguinte maneira: no capítulo 2 são apresentados os tipos de modelos numéricos de transporte de constituintes e alguns exemplos aplicados à área de petróleo; no capítulo 3, referente à metodologia, o modelo de transporte de óleo NICOIL é apresentado, assim como sistemas de grade adaptativa em modelagem numérica, o método de AMR e o método adaptativo para modelagem de transporte de óleo no mar desenvolvido neste trabalho; no capítulo 4, o experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo NICOIL é descrito e seus resultados analisados; no capítulo 5 é realizada uma discussão sobre os resultados; e no capítulo 6, são apresentadas as conclusões.

2. Modelagem de transporte de constituintes

A dispersão de constituintes em corpos d'água é um processo complexo. Quando define-se uma escala de interesse a um fenômeno em estudo, há dois tipos de movimentos, o resolvível (que pode ser observado e medido na escala de interesse) chamado advectivo, e o não resolvível (que tem que ser modelado de algum modo através de variáveis na escala resolvível) chamado difusivo.

O transporte de constituintes presentes na constituição da massa de uma partícula de água de qualquer corpo d'água natural pode ser determinado a partir do princípio da conservação da massa do constituinte (ROSMAN, 1997).

O modelo conceitual deste princípio pode ser escrito como: "A variação por unidade de tempo da massa de contaminante dentro de um volume de controle, é igual ao fluxo de entrada menos o fluxo de saída, mais a massa resultante das reações de produção ou consumo no interior do volume por unidade de tempo" (ROSMAN, 1997).

Supondo que o volume de controle seja um cubo de dimensões Δx , Δy e Δz , a massa de constituinte no interior do cubo em um dado instante será o produto da concentração de constituinte C pelo volume $\Delta x \Delta y \Delta z$. Na Figura 2.1 está representado o esquema do balanço de massa de constituinte na direção x . O fluxo de saída é obtido a partir do fluxo de entrada, por expansão em série de Taylor ao longo de Δx .

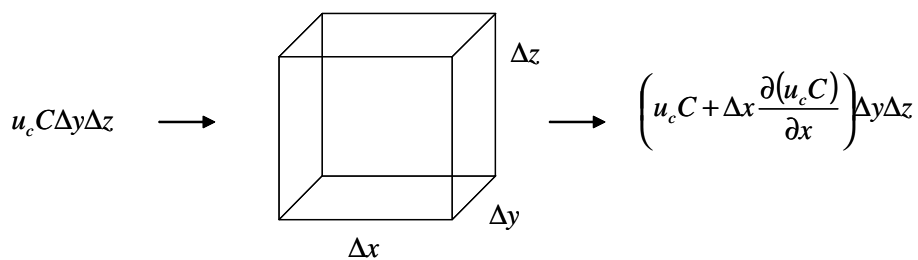


Figura 2.1. Esquema do balanço de massa de constituinte na direção x .

No esquema representado na Figura 2.1, u_c corresponde à componente de velocidade de transporte do constituinte na direção x .

Para as direções y e z, o esquema é semelhante, considerando os fluxos $v_c C D_x D_z$ e $w_c C D_x D_y$ e expansões em série de Taylor ao longo de D_y e D_z (v_c e w_c correspondem às componentes de velocidade de transporte do constituinte nas direções y e z respectivamente).

O fluxo de entrada menos o fluxo de saída na direção x é:

$$u_c C \Delta y \Delta z - \left(u_c C \Delta y \Delta z + \frac{\partial(u_c C)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \right) = - \frac{\partial(u_c C)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (\text{Equação 2.1})$$

Expressando-se essa quantidade por unidade de volume, segue-se que a variação local da concentração C de constituinte, em decorrência de um fluxo resultante na direção x é dada por: $-\frac{\partial u_c C}{\partial x}$.

Considerando-se as demais direções, segue-se que a variação local resultante de concentração é dada pela seguinte equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left(\frac{\partial u_c C}{\partial x} + \frac{\partial v_c C}{\partial y} + \frac{\partial w_c C}{\partial z} \right) + \Sigma R_c \quad (\text{Equação 2.2})$$

onde R_c = reações de produção e consumo do constituinte.

Na Equação 2.2, a velocidade de transporte do constituinte, com componentes u_c , v_c e w_c , não é resolvível, uma vez que não se consegue medir a velocidade exata com que um constituinte é transportado no meio fluido. O que é resolvível, e mensurável, é a velocidade do escoamento, com componentes u , v e w . Para resolver esta questão um artifício matemático é utilizado, separando-se o fluxo de constituinte em uma parte resolvível e outra não resolvível:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left[\left(\frac{\partial u_c C}{\partial x} + \frac{\partial v_c C}{\partial y} + \frac{\partial w_c C}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial u C}{\partial x} + \frac{\partial v C}{\partial y} + \frac{\partial w C}{\partial z} \right) - \left(\frac{\partial u C}{\partial x} + \frac{\partial v C}{\partial y} + \frac{\partial w C}{\partial z} \right) \right] + \Sigma R_c \quad (\text{Equação 2.3})$$

∴

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{-\left(\frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z}\right)}_{\text{taxa de variação espacial do fluxo resolvível em x, y e z}} - \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial x}(u_c - u)C + \frac{\partial}{\partial y}(v_c - v)C + \frac{\partial}{\partial z}(w_c - w)C\right]}_{\text{taxa de variação espacial do fluxo não resolvível em x, y e z}} + \Sigma R_c$$

(Equação 2.4)

Parametrizando-se o fluxo difusivo turbulento (fluxo não resolvível), por meio de uma lei semelhante à Lei de Fick, onde $F = -K \frac{\partial C}{\partial n} = -K \left(\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \right)$, temos:

$$[(u_c - u) + (v_c - v) + (w_c - w)]C = -K \left(\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad \text{(Equação 2.5)}$$

onde $K =$ coeficiente de difusão turbulenta; $\left(\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \right) =$ gradiente de concentração, o qual apresenta sinal negativo, indicando que o fluxo orienta-se das regiões de alta concentração de constituinte para as de baixa concentração.

Após a substituição de (2.5) em (2.4), o princípio de conservação de massa por unidade de volume passa ser escrito como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z}\right) + K \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + \Sigma R_c \quad \text{(Equação 2.6)}$$

Expandindo-se o termo advectivo da Equação 2.6,

$$-\left(\frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z}\right) = -\left(C \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial C}{\partial x} + C \frac{\partial v}{\partial y} + v \frac{\partial C}{\partial y} + C \frac{\partial w}{\partial z} + w \frac{\partial C}{\partial z}\right) =$$

e considerando-se a condição de incompressibilidade do fluido, onde $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$,

a partir da verificação de que nos escoamentos naturais as variações de volume por variação de pressão são desprezíveis:

$$= - \left[C \underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)}_{=0} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right] = - \left(u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right)$$

obtém-se a Equação 2.7, conhecida como equação de transporte advectivo-difusivo de constituintes:

$$\underbrace{\frac{\partial C}{\partial t}}_{\text{variação local no tempo}} = - \underbrace{\left(u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{balanço do fluxo advectivo}} + K \underbrace{\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)}_{\text{balanço do fluxo difusivo}} + \underbrace{\Sigma R_c}_{\text{reações de produção ou consumo}} \quad (\text{Equação 2.7})$$

Quando o constituinte considerado é passivo, como é o caso neste trabalho, o campo de velocidades independe de C , o que torna o estudo do transporte do constituinte desacoplado da modelagem hidrodinâmica.

Como dito anteriormente, a equação de transporte advectivo-difusivo pode ser utilizada para descrever a dispersão de constituintes em corpos d'água. Para isto, esta equação pode ser resolvida aplicando métodos discretos na formulação Euleriana, que é a abordagem clássica utilizada em modelagem de dispersão (NOYE, 1987, *apud* JIN, 1993).

Outros tipos de modelos de dispersão são baseados na abordagem Lagrangeana, ou método de trajetória de partículas.

2.1. Abordagem Euleriana

Nos modelos baseados na abordagem Euleriana, que utilizam a equação de transporte advectivo-difusivo, a descrição do movimento da mancha de constituintes depende do referencial. Nesses modelos, as variáveis dependem do tempo e da posição, a qual varia no tempo. Na região de medição das velocidades, a cada instante estamos observando (medindo) a velocidade de diferentes partículas, podendo haver variações na velocidade do escoamento.

Matematicamente, escreve-se $C=C(t,x(t),y(t),z(t))$, onde o valor da variável C é função do tempo t e da posição $x(t)$, $y(t)$ e $z(t)$ que varia no tempo.

2.2. Abordagem Lagrangeana

Nos modelos Lagrangeanos, a massa total de constituinte é representada por um grande número de pontos discretos de massa, ou partículas, que representam iguais quantidades de constituinte.

O movimento é descrito observando e acompanhando a trajetória de cada uma dessas partículas. A incógnita básica não é a concentração mas a posição das partículas, e as velocidades são interpoladas a partir de seus valores em pontos onde estas são conhecidas previamente.

Cada partícula representa o centro de massa de uma pequena mancha com uma certa distribuição de concentração. E a distribuição de concentração do constituinte no meio, $C(x,y,z,t)$, é dada de forma indireta, pela soma de todas as manchas.

A abordagem lagrangeana apresenta um caráter híbrido, em parte determinístico, associado ao campo de velocidade médio, e em parte estocástico, associado à difusão turbulenta, que é modelada adicionando-se componentes aleatórias ao deslocamento advectivo das partículas (JIN, 1993).

A função densidade de probabilidade da posição das partículas utilizada em modelos do tipo lagrangeano satisfaz a equação de Fokker-Planck (FELLER, 1971, *apud* JIN,1993), que é análoga à equação de transporte advectivo-difusivo.

Nesta abordagem, a acurácia da previsão das concentrações está diretamente relacionada ao número de partículas utilizado, o que em alguns casos pode resultar num custo computacional bastante elevado.

2.3. Aplicações na indústria do petróleo

Nesta seção serão apresentados, em ordem cronológica, alguns exemplos de modelos que vêm sendo desenvolvidos e/ou aprimorados ao longo das últimas décadas para monitoramento de derramamentos de óleo no mar, rios e lagos.

- SHEN et al. (1987) desenvolveram um modelo computacional lagrangeano para simular a trajetória de manchas de óleo em rios e lagos, que considera a transformação da mancha de óleo devido aos processos de advecção, espalhamento, evaporação e dissolução.
- O modelo lagrangeano COZOIL (*Coastal Zone Oil Spill Model*) foi desenvolvido pelo *U.S. Minerals Management Service* em 1988 para modelagem de transporte de óleo nas águas do Alaska, considerando os processos de espalhamento, evaporação, entranhamento, emulsificação e interação com a costa (REED & KNAUSS, 1988).
- O modelo lagrangeano OILMAP (*Oil Spill Model and Response System*) foi desenvolvido pela ASA (*Applied Science Associates*) (HOWLETT et al., 1993, apud CHAO et al. 2001), para fornecer previsões sobre movimento do óleo derramado na superfície do oceano, considerando os processos de espalhamento, evaporação, emulsificação, entranhamento, interação com a costa e com o gelo. Já o modelo SIMAP (*Oil Spill Impact Model System*) da ASA, disponível a partir de 1994, estende os algoritmos do OILMAP da superfície da água para o interior da coluna d'água. Algoritmos que incluem espalhamento, evaporação, dispersão, emulsificação, entranhamento, dissolução, sedimentação e degradação do óleo (McCAY et al., 2003).
- O modelo ADIOS (*Automated Data Inquiry for Oil Spills*) foi desenvolvido pelo *National Oceanic and Atmospheric and Administration Hazardous Materials response Division* (NOAA/HAZMAT), com colaboração do *United States Coast*

Guard e do *United States Minerals Management Service*, para ajudar no controle à poluição por óleo.

A primeira versão deste modelo, ADIOS1, foi disponibilizada à comunidade científica em 1994, e a segunda, ADIOS2, em 1999.

O ADIOS realiza estimativas dos processos de decaimento do óleo ao longo dos primeiros dias após o acidente, não se atendo a previsões de trajetória. Este modelo utiliza e fornece uma grande base de dados com informações a respeito das características de cerca de mil tipos de óleo diferentes, e considera os processos de espalhamento, evaporação, dispersão, sedimentação e emulsificação (LEHR *et al.*, 2002).

- O GULFSPILL consiste em um conjunto de quatro modelos: OILPOL, GULFTRACK, OILPOL-S e QUIKSLIK, desenvolvido pelo *Hydrodynamic and Environmental Modeling Group of the Center for Environment and Water* do KFUPM/RI (*Research Institute of King Fahd University of Petroleum and Minerals*) para previsão de trajetória e comportamento de manchas de óleo no Golfo Árabe.

O OILPOL foi o primeiro dos quatro programas a ser desenvolvido, sendo disponibilizado à comunidade científica em 1995. O conjunto GULFSPILL, já com a segunda versão do OILPOL, foi disponibilizado em 2000.

O GULFSPILL contém o modelo OILPOL, que utiliza dados de velocidade de corrente gerados por um modelo hidrodinâmico tridimensional cuja grade abrange todo o Golfo; o modelo QUIKSLIK, que não considera a hidrodinâmica mas apenas a contribuição do vento no transporte do óleo; o modelo de trajetória GULFTRACK, que prevê a posição futura de uma mancha de óleo, sem considerar processos de decaimento, e utilizando os mesmos dados hidrodinâmicos que o OILPOL; e o modelo OILPOL-S, adequado à pequenos derramamentos que possam ocorrer dentro do Golfo. A hidrodinâmica neste caso é gerada por um modelo hidrodinâmico tridimensional, que utiliza uma grade aninhada na região onde requer-se mais detalhamento.

Nos modelos do GULFSPILL, o método utilizado para o cálculo do transporte é o lagrangeano, e os processos de decaimento de óleo considerados no OILPOL,

OILPOL-S e no QUIKSLIK são evaporação, emulsificação, dispersão, interação com a costa e espalhamento (AL-RABEH *et al.*, 2000).

- MOTHY (*Modèle Océanique de Transport d'Hydrocarbures*) é um sistema integrado operacional para modelagem tridimensional de dispersão de óleo desenvolvido pelo Météo-France (DANIEL, 1996). O MOTHY inclui um modelo hidrodinâmico e um modelo lagrangeano de dispersão de óleo, que não considera os processos de decaimento do óleo.
- O GNOME (*General NOAA Oil Modelling Environment*), modelo lagrangeano disponibilizado ao público em 1999, foi desenvolvido pelo HAZMAT (*Hazardous Materials Response Division*) do NOAA OR&R (*National Oceanic and Atmospheric Administration Office of Response and Restoration*) para simular a trajetória do óleo na superfície do oceano considerando as influências das correntes, vento e maré (GNOME, 2002).
- O MOSM (*Multiphase Oil Spill Model*) é um modelo euleriano desenvolvido por TKALICH *et al.* (1999, *apud* TKALICH *et al.*, 2003) para simular o transporte de óleo no meio marinho.
No MOSM, variáveis em seis estados são calculadas simultaneamente (o que o faz ser considerado multi-fásico): espessura da mancha de óleo na superfície da água, concentração de óleo na coluna d'água nas fases dissolvida, emulsificada e particulada, e concentração de óleo nos sedimentos de fundo nas fases dissolvida e particulada.
- O modelo de transporte de óleo NICOIL foi desenvolvido pelo Laboratório de Modelagem de Processos Marinhos e Atmosféricos (LAMMA) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) para simular o comportamento e a trajetória do óleo no ambiente marinho (LIMA *et al.*, 2001).
A primeira versão do NICOIL foi desenvolvida em 2000 pelo LAMMA/UFRJ, em cooperação com o CENPES/PETROBRAS (Centro de Pesquisa e Desenvolvimento Leopoldo Americo Miguez de Mello).

Trata-se de um modelo bidimensional baseado na abordagem euleriana, que inclui formulações matemáticas empíricas que resolvem os processos de espalhamento, volatilização e "entranhamento" do óleo na coluna d'água.

- CHAO *et al.* (2001) desenvolveram um modelo lagrangeano bidimensional para simular a trajetória de uma mancha de óleo na superfície do oceano, considerando os processos de advecção, difusão turbulenta, evaporação e a dissolução. O modelo foi desenvolvido para aplicação no Estreito de Singapura, importante rota de navios petroleiros.

3. Metodologia

3.1. O Modelo NICOIL

O modelo de transporte de óleo NICOIL foi desenvolvido pelo Laboratório de Modelagem de Processos Marinhos e Atmosféricos (LAMMA) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) para simular o comportamento e a trajetória do óleo no ambiente marinho (LIMA *et al.*, 2001).

Trata-se de um modelo bidimensional baseado na abordagem euleriana que simula a dispersão do óleo em termos da variação da espessura da camada flutuante (j) nas direções x e y .

Para realizar este tipo de previsão o NICOIL faz uso da equação de transporte advectivo-difusivo de constituintes, incluindo formulações matemáticas empíricas que resolvem os processos de evaporação, espalhamento e "entranhamento" do óleo na coluna d'água (Equação 3.1.1).

$$\frac{dj}{dt} = \frac{\partial j}{\partial t} + u \frac{\partial j}{\partial x} + v \frac{\partial j}{\partial y} = K \left(\frac{\partial^2 j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 j}{\partial y^2} \right) + Evap + Esp + Entr$$

(Equação 3.1.1)

onde K = coeficiente de difusão turbulenta;

$Evap$ = parcela que evapora;

Esp ao espalhamento;

$Entr$ = porção que "entranha" no meio.

Neste algoritmo a Equação 3.1.1 é resolvida utilizando-se o esquema numérico de diferenças finitas *Euler Forward* para o tempo e o esquema CUICKEST (*Cubic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms*) para o espaço. A descrição detalhada desses esquemas numéricos é encontrada no apêndice A.

No NICOIL, a difusão turbulenta é considerada isotrópica, sendo parametrizada segundo a formulação de Smagorinsky (SMAGORINSKY *et al.*, 1965, *apud* EZER & MELLOR, 1997), onde o coeficiente de difusão (K) é calculado da seguinte maneira:

$$K = c \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2}$$

(Equação 3.1.2)

onde Δx e Δy = espaçamentos de grade nas direções x e y respectivamente;

c = coeficiente empírico, que a partir da formulação de EZER & MELLOR (1997), foi definido com o valor de 0,2;

u e v = componentes de velocidade horizontal nas direções x e y, respectivamente.

As formulações paramétricas utilizadas para resolver os processos de decaimento de óleo considerados pelo modelo NICOIL são apresentadas no apêndice B.

Este modelo é aplicável a vazamentos instantâneos e contínuos, e vem sendo implementado tanto para regiões oceânicas, como para regiões costeiras e ambientes fluviais.

O comportamento de outros poluentes passivos no escoamento também pode ser investigado através da aplicação do NICOIL, considerando-se o processo de advecção e, se for o caso, algum processo de perda de massa característico do constituinte em questão.

3.2. Sistema de grade adaptativa em modelagem numérica

3.2.1. Método AMR – *Adaptive Mesh Refinement*

O método de grade adaptativa AMR (*Adaptive Mesh Refinement*) para grades estruturadas foi introduzido por BERGER & OLIGER (1984), sendo desenvolvido para solução de sistemas de equações diferenciais parciais utilizando técnicas de diferenças finitas, com o objetivo de obter uma dada eficiência com um mínimo de esforço computacional.

A motivação para a elaboração do método AMR, surgiu de um estudo de Joseph Olinger em 1979 sobre métodos de aproximação para solução de problemas de circulação oceânica e atmosférica (BERGER & OLIGER, 1984).

Este método é baseado em uma hierarquia de níveis de resolução. Cada nível é dividido em retângulos (sub-grades) que podem variar de tamanho e de posição à medida que a solução ocorre no tempo (BERGER & OLIGER, 1984; BERGER & COLELLA, 1989; HERRNSTEIN *et al.*, 2004).

Estimativas de erro de truncamento são realizadas a intervalos regulares para detectar os pontos de grade onde uma grade mais fina é necessária, ou onde uma já existente não é mais necessária. Para realizar estas estimativas, o método AMR utiliza uma técnica baseada na extrapolação de Richardson (BERGER & OLIGER, 1984; BLAYO & DEBREU, 1999).

Esta técnica consiste em comparar a solução da integração obtida para dois passos de tempo Δt em uma grade uniforme de espaçamento Δx , com a solução obtida para um passo de tempo correspondente a $2 \cdot \Delta t$ em uma grade uniforme de resolução $2 \cdot \Delta x$. A diferença entre as duas soluções numéricas fornece a estimativa do erro local de truncamento, que pode ser facilmente implementada em todos os níveis da grade hierárquica (DEBREU, 2000).

A detecção de valores altos de erros de truncamento a partir da utilização desta técnica, indica os pontos de grade onde é necessária a adaptação de uma nova grade. Esses pontos são englobados por um retângulo, que constitui o domínio da nova grade de alta resolução, sendo que segundo BERGER & COLELLA (1989) seus limites devem coincidir com as linhas de grade da grade base.

No início da simulação somente a grade base, que cobre todo o domínio de integração, é especificada, e esta permanece fixa durante todo o processo. No decorrer da simulação, sub-grades vão sendo criadas em resposta a alguma feição na solução transiente. Este procedimento de adaptação de grade ocorre periodicamente, e torna possível a criação de grades refinadas ou a retirada de grades já existentes (BERGER & OLIGER, 1984).

É importante entender que as sub-grades são sobrepostas à grade base, e que cada uma é definida independentemente das outras, com sua própria solução vetorial, conservação, etc.

Segundo BERGER & OLIGER (1984), o método AMR permite que diferentes integradores sejam utilizados em diferentes regiões do domínio. Podendo-se ainda resolver diferentes equações nas diferentes grades.

O nível de uma grade é definido como sendo o número de grades grosseiras (de menor resolução) que vem antes desta. A grade base G_0 está no nível 0 da hierarquia. As sub-grades de G_0 são G_1 e estão no nível 1 de refinamento. Grades refinadas dentro das grades G_1 são de nível 2 e denotadas G_2 , e assim por diante.

Desta maneira, a seqüência de grades aninhadas com discretizações cada vez maiores vão sendo criadas em algumas regiões do domínio espacial, como pode ser observado na Figura 3.2.1.1.

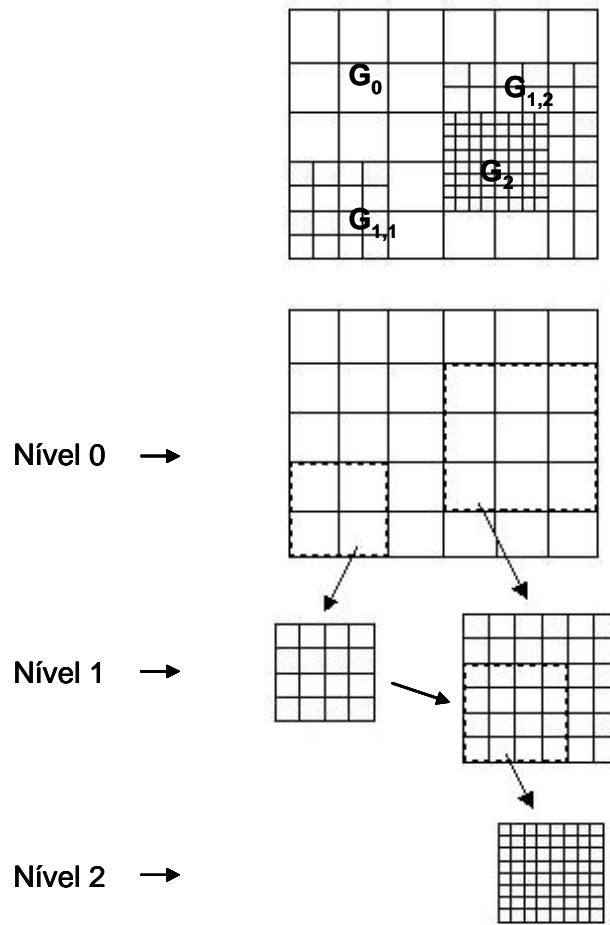


Figura 3.2.1.1. Sequência de grades aninhadas (Figura adaptada de BLAYO & DEBREU, 1999).

Segundo BERGER & OLIGER (1984) e BERGER & COLELLA (1989) um conjunto de possíveis discretizações de grade deve ser especificado anteriormente. A estratégia de refinamento descrita por esses autores consiste em manter uma razão constante entre o intervalo de tempo e o espaçamento de grade em todas as grades, o que faz com que o algoritmo seja de refinamento no espaço e no tempo.

A razão de refinamento de resolução espacial e temporal entre dois níveis adjacentes deve ser dada por um inteiro r ($r= 2, 3$ ou 4).

$$\frac{\Delta h_l}{\Delta h_{l+1}} = \frac{\Delta t_l}{\Delta t_{l+1}} = r$$

onde Δh_l = espaçamento de grade;

Δt_l = passo de tempo para a grade de nível l .

Por convenção, uma vez que o espaçamento de grade e o passo de tempo iniciais (Δs_0 e Δt_0) são definidos na grade base, a condição de estabilidade de Courant-Friedrichs-Levi (CFL) é automaticamente verificada para todas as grades subseqüentes.

A integração é iniciada na grade base, e sua solução é avançada um passo de tempo. Esta solução é interpolada no tempo e no espaço para fornecer condições iniciais e de contorno para as grades de nível l , que podem então ser avançadas n passos de tempo, e assim sucessivamente para os próximos níveis de grade.

O método AMR vem sendo aplicado com êxito em estudos de previsão numérica do tempo, e em estudos de modelagem oceânica (SKAMAROCK *et al.* (1989, *apud* BLAYO & DEBREU, 1999); SKAMAROCK & KLEMP (1993, *apud* BLAYO & DEBREU, 1999); BLAYO & DEBREU (1999); DEBREU (2000); BLAYO & DEBREU (2002); HERRNSTEIN *et al.* (2004)).

Na seção 3.2.2 será apresentado o método adaptativo desenvolvido neste trabalho especificamente para modelagem de transporte de óleo no mar, e uma breve discussão a respeito das similaridades e diferenças existentes entre os dois métodos.

3.2.2. Método adaptativo para modelagem de transporte de óleo no mar

O algoritmo de grade adaptativa apresentado neste trabalho foi desenvolvido com base em uma metodologia especificamente voltada para a resolução de problemas relacionados à modelagem de transporte de óleo no mar.

Essa metodologia visa a redução dos custos de cálculo e a preservação da qualidade da solução numérica em simulações onde as estruturas de interesse (manchas de óleo) podem, além de apresentar uma variabilidade espaço-temporal significativa (ou seja, apresentar deformações e deslocamentos à medida que são transportadas por um escoamento transiente), sofrer a influência de reações ao longo do domínio de integração.

A característica principal deste método é a capacidade de acompanhar a trajetória de uma mancha de óleo pelo domínio de integração, ajustando localmente grades regulares de resoluções variáveis.

Neste método, assim como no AMR, as sub-grades adaptadas são sobrepostas à grade base, e cada uma é integrada independentemente das outras.

Os dois métodos, entretanto, apresentam algumas diferenças:

- No método AMR, à medida que vão sendo criadas, as sub-grades apresentam discretizações espaço-temporais cada vez maiores, discretizações estas determinadas no início da simulação. Além disso, a razão de refinamento de resolução espacial e temporal entre dois níveis adjacentes de grades, neste método, deve obrigatoriamente, ser dada por um inteiro; Já no método adaptativo de transporte desenvolvido, as discretizações são determinadas no decorrer do processo de integração em função da dimensão da mancha de óleo, podendo caracterizar sub-grades de menor ou maior resolução independentemente da seqüência em que são criadas. E, nesse caso, a razão de refinamento não necessariamente será dada por um inteiro.
- No método AMR, a especificação das regiões do domínio espacial onde é necessária a adaptação de uma nova grade é feita com base em estimativas de erros de truncamento, realizadas a intervalos regulares de tempo;

Já no método adaptativo de transporte desenvolvido, as posições das sub-grades dependem da relação entre a dimensão da mancha de óleo e a grade, e consequentemente sua discretização.

- No método AMR, o procedimento de adaptação de grade é periódico, ocorrendo a intervalos regulares de tempo definidos no início da simulação;

No método adaptativo de transporte, o principal fator que determina a necessidade de adaptação de uma nova grade durante o processo de transporte é a variação de dimensão da mancha de óleo, sendo que a adaptação pode ocorrer também em instantes pré-determinados da integração, não necessariamente em intervalos regulares.

A seguir será apresentada uma descrição detalhada do funcionamento do método adaptativo de transporte desenvolvido neste trabalho.

3.2.2.1. Características das sub-grades

O método adaptativo específico para modelagem de transporte de óleo permite que em determinados instantes de integração, uma sub-grade seja adaptada abrangendo a região do domínio que englobe a região aonde a mancha de óleo estiver localizada.

A dimensão desta sub-grade é determinada em função da dimensão da mancha*¹ no instante da adaptação, da velocidade máxima do escoamento na região e da quantidade de tempo que se queira transportar a mancha nesta sub-grade. Os limites desta sub-grade devem coincidir com as linhas de grade da grade base.

A dimensão da mancha no instante da adaptação é importante para a definição da resolução espacial desta sub-grade. Isto porque é fundamental que no decorrer do processo de integração, a mancha de óleo esteja sempre muito bem representada pelo algoritmo, ou seja, que um número mínimo de pontos discretos seja utilizado de maneira a resolvê-la com eficiência*².

A resolução espacial da sub-grade (ds) é portanto calculada durante a integração, a partir da razão entre a dimensão da mancha (dim) no instante da adaptação e o número mínimo de pontos discretos (np) definido no início da simulação menos 1 (o que corresponde ao número de elementos de grade). Ou seja, $ds_{sub-grade} = \frac{dim}{np - 1}$.

A adaptação da sub-grade é enfim concretizada com a interpolação dos valores de espessura de óleo para a resolução espacial determinada.

Sendo importante lembrar que para a realização do transporte nesta sub-grade adaptada, não só os dados de espessura são interpolados para a resolução determinada, mas também os dados de velocidade de corrente.

*¹ – A dimensão da mancha corresponde ao menor comprimento encontrado entre as distâncias dos extremos da mancha de óleo nos eixos x e y. Utiliza-se o menor comprimento por representar o caso mais restritivo, que impõe a utilização de uma resolução espacial maior na sub-grade aonde será realizado o transporte.

*² – O número mínimo de pontos discretos utilizado na resolução da mancha é estimado a partir do experimento descrito no capítulo 3, seção 3.2.2.4. Experimento inspirado no estudo de MOLENKAMP (1968), que objetivou a obtenção da relação ótima entre a variação de massa e o número de pontos necessários para resolver discretamente uma mancha de óleo, utilizando o sistema de transporte de óleo NICOIL.

3.2.2.2. Interpolação dos dados

Serão descritos a seguir os métodos de interpolação utilizados pelo algoritmo adaptativo de transporte para adequar os dados de espessura de óleo e de velocidade de corrente à resolução espacial definida como a apropriada para a realização do transporte na sub-grade.

3.2.2.2.1. Dados de espessura do óleo

Foi implementado no algoritmo adaptativo de transporte, um método de interpolação conhecido como o método do vizinho mais próximo (DAVIS, 1973), para interpolar os dados de espessura do óleo.

Neste método os valores interpolados são calculados em função de um número determinado n de pontos vizinhos mais próximos. Para isso, as distâncias das coordenadas dos pontos vizinhos a cada uma das coordenadas dos pontos de grade da matriz após a interpolação são calculadas:

$$D_{ik} = \sqrt{(X_k - X_i)^2 + (Y_k - Y_i)^2} \quad (\text{Equação 3.2.2.2.1.1})$$

onde X_k e Y_k = coordenadas dos pontos da matriz após a interpolação em x e y, respectivamente; X_i e Y_i = coordenadas dos pontos da matriz a ser interpolada em x e y, respectivamente.

Uma vez calculadas as distâncias (D_{ik}), os valores de espessura (j_k) para cada ponto de grade da matriz após a interpolação são estimados através da seguinte equação (DAVIS, 1973).:

$$j_k = \frac{\sum_{i=1}^n (j_i / D_{ik})}{\sum_{i=1}^n (1 / D_{ik})} \quad (\text{Equação 3.2.2.2.1.2})$$

É importante lembrar que a matriz de dados de espessura de óleo a ser interpolada corresponde ao instante final de transporte na última sub-grade adaptada. E que se for o caso de uma primeira adaptação, a matriz irá corresponder à um ‘recorte’ da grade base na região delimitada pela sub-grade 1.

Na interpolação dos dados de espessura, apenas a região da mancha é interpolada, uma vez que esta corresponde à única região da matriz de dados que apresenta valores diferentes de zero. Esses valores interpolados são posteriormente atribuídos à uma grade de mesma dimensão e resolução espacial determinada, configurando assim a sub-grade adaptada adequada ao transporte. Esta estratégia de interpolação resulta em uma economia considerável de tempo de cálculo.

3.2.2.2.2. Dados de velocidade de corrente

Os dados de velocidade de corrente são interpolados no algoritmo adaptativo de transporte através do método de interpolação linear, ilustrado na Figura 3.2.2.2.1.

Neste método de interpolação, a partir de valores conhecidos y_1 e y_2 nos pontos x_1 e x_2 , valores intermediários são calculados através da seguinte equação geométrica:

$$y' = \frac{(y_2 - y_1)(x' - x_1)}{x_2 - x_1} + y_1 \quad (\text{Equação 3.2.2.2.1})$$

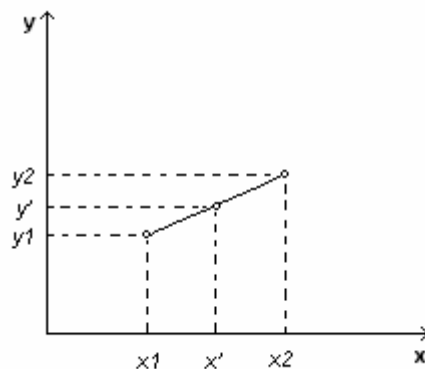


Figura 3.2.2.2.1. Um segmento de reta unindo dois pontos entre os quais deseja-se realizar interpolação linear.

Com relação aos dados de velocidade, a matriz a ser interpolada corresponde sempre a um ‘recorte’ da grade base na região delimitada pela sub-grade adaptada, e nesse caso, toda a matriz de dados deve ser interpolada para a resolução espacial determinada.

3.2.2.3. Integração, procedimento de adaptação de grade e transporte

A integração no algoritmo adaptativo de transporte é iniciada a partir da definição da grade base que serve como inicialização do processo.

O passo seguinte consiste na localização da mancha de óleo dentro do domínio pela primeira vez; resultando na adaptação da primeira sub-grade, e no primeiro transporte.

O procedimento de adaptação de grade ocorre em instantes determinados da integração, definidos no início da simulação; e, além disso, o algoritmo considera que se houver, durante o transporte, um acréscimo ou um decréscimo na dimensão da mancha de um percentual definido, uma nova sub-grade deve ser adaptada.

Isto é possível porque durante o transporte em uma dada sub-grade adaptada, a intervalos regulares de tempo, a mancha tem a sua dimensão monitorada, o que pode sinalizar a necessidade de reinicialização do procedimento de adaptação.

Como já dito anteriormente, neste algoritmo adaptativo de transporte, as resoluções espaciais das sub-grades vão sendo calculadas ao longo da simulação. A partir disso, respeitando o critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Levi (CFL), as resoluções temporais também vão sendo definidas.

Um resumo explicativo a respeito do funcionamento do algoritmo adaptativo de transporte está representado no Esquema 3.2.2.3.1.

Algoritmo adaptativo de transporte de óleo

Inicialização

- Definição do número de pontos da grade base nas direções x e y;
- Definição da dimensão da grade base nas direções x e y (em metros);
- Definição da resolução espacial da grade base (em metros);
- Definição do tempo de simulação em cada sub-grade*¹ (em segundos);
- Definição do campo de espessura de óleo inicial, volume de óleo, coordenadas do ponto de "vazamento".
- Leitura do campo de velocidades de correntes;
- Definição dos intervalos de adaptação de grade;
- Definição do limiar de adaptação*²;
- Definição do número de pontos utilizados na discretização da mancha*³;

'Loop' de intervalos de adaptação de grade

Subrotina I – Localização da mancha

- Cálculo das distâncias dos extremos da mancha de óleo em relação a origem do domínio;
- Cálculo da dimensão da mancha.

Subrotina II – Velocidade na região da mancha

- Detecção do maior valor de velocidade encontrado na região da mancha.

Subrotina III – Estimativa da sub-grade

- Cálculo das discretizações espaciais e temporais da sub-grade adaptada;
- Estimativa das dimensões da sub-grade adaptada nas direções x e y;
- Cálculo das distâncias dos extremos da sub-grade adaptada à origem do domínio;
- Cálculo do número de pontos de grade nas direções x e y, abrangendo a região ocupada pela mancha, antes da interpolação*⁴;
- Cálculo do número total de pontos de grade, abrangendo a região ocupada pela mancha, antes da interpolação*⁴;
- Cálculo do número de pontos de grade nas direções x e y, abrangendo a região ocupada pela mancha, após a interpolação*⁴;
- Cálculo do número de pontos de grade nas direções x e y, abrangendo a região a ser ocupada pela sub-grade adaptada, antes da interpolação*⁵;
- Cálculo do número total de pontos de grade, abrangendo a região a ser ocupada pela sub-grade adaptada, antes da interpolação*⁵;
- Cálculo do número de pontos de grade nas direções x e y, abrangendo a região a ser ocupada pela sub-grade adaptada, após a interpolação*^{5,6};

Continuação na pág. 27

Subrotina IV – Criação da sub-grade

- Condição que determina se há necessidade de se realizar o processo de interpolação ou não;
- 'Recorte' da matriz de dados de espessura referentes à grade anterior na região da mancha;
- interpolação dos dados para a discretização espacial da sub-grade adaptada;
- Composição da sub-grade adaptada (atribuição dos dados de espessura interpolados relativos à área da mancha à matriz referente à sub-grade adaptada);
- Cálculo de conservação de massa (relação entre as massas antes e depois da interpolação).

Subrotina V – Velocidade

- 'Recorte' das matrizes de u e v de velocidades de correntes relativos à grade base para a região da sub-grade adaptada;
- Interpolação dos dados para a discretização espacial da sub-grade adaptada.

Subrotina VI – Transporte

- Definição do número de passos de tempo para a realização do transporte na sub-grade adaptada;
- Transporte;
- Condição de adaptação da grade em função da variação de dimensão da mancha;
- Cálculo da conservação de massa (relação entre as massas, antes e depois do transporte).

Fim do 'loop'

- *¹ - Este tempo, que é pré-determinado, pode modificar se houver a necessidade de interrupção do processo de transporte para realização de uma nova adaptação devido à variação de dimensão da mancha.
- *² - Este limiar define a partir de que porcentagem de variação da dimensão da mancha ocorrerá a adaptação de grade.
- *³ - Número estimado a partir dos testes descritos no capítulo 3, seção 3.2.2.4.
- *⁴ - Cálculo necessário para a interpolação dos dados de espessura de óleo, realizada na subrotina IV.
- *⁵ - Cálculo necessário para a interpolação dos dados de velocidade, realizada na subrotina V.
- *⁶ - Cálculo necessário para a composição da sub-grade adaptada, no final da subrotina IV.

Esquema 3.2.2.3.1. Resumo explicativo do funcionamento do algoritmo adaptativo de transporte

3.2.2.4. Experimento realizado para a definição do número de pontos utilizados na discretização de uma mancha de óleo

Nesta seção será descrito o primeiro experimento realizado neste trabalho, parte integrante da metodologia desenvolvida para elaboração do algoritmo adaptativo para implementação no modelo de transporte de óleo NICOIL.

A motivação para a realização deste experimento foi a necessidade de controle do número de pontos discretos necessário para tratar eficientemente uma mancha de óleo no decorrer de uma simulação numérica com relação à conservação de massa, informação fundamental para o desenvolvimento do algoritmo adaptativo de transporte.

No desenvolvimento deste experimento foram realizadas três simulações baseadas no estudo de MOLENKAMP (1968), utilizando os esquemas numéricos de diferenças finitas utilizados pelo modelo NICOIL na resolução da equação de transporte advectivo-difusivo de constituintes: *Euler Forward* para o tempo e CUICKEST (*Cubic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms*) para o espaço.

Em seu estudo, MOLENKAMP (1968) fez uma análise comparativa da eficiência de diferentes esquemas numéricos na resolução da equação do transporte advectivo-difusivo, desconsiderando o termo referente à difusão.

Para investigar a acurácia de diferentes aproximações de diferenças finitas MOLENKAMP (1968) aplicou cada uma delas a um mesmo problema. O objetivo era analisar a eficiência de cada uma na conservação de massa de constituintes advectada em um campo com fluxo de velocidade circular. Após cada período de rotação, a mancha devia retornar a sua posição inicial sem mudanças na distribuição de concentração. Caso houvesse alteração, assumia-se que esta havia sido introduzida pelo próprio esquema numérico, podendo-se desta forma avaliar qual dos esquemas numéricos utilizados teria apresentado maior eficiência.

A idéia de advectar uma mancha de constituintes em um campo com fluxo de velocidade circular sem considerar o processo de difusão, e o estudo da conservação de massa foram incorporados no experimento apresentado nesta seção, assim como a formulação de distribuição inicial de espessura (j) da mancha:

$$\mathbf{j}(x, y) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{\Delta} r & \text{para } r < \Delta \\ 0 & \text{para } r \geq \Delta \end{cases}$$

$$\text{onde } r = \sqrt{[(x - x')^2 + (y - y')^2]}$$

onde x' e y' = localização da região de máxima espessura de constituintes.

A distribuição inicial da espessura está representada na Figura 3.2.2.4.1.

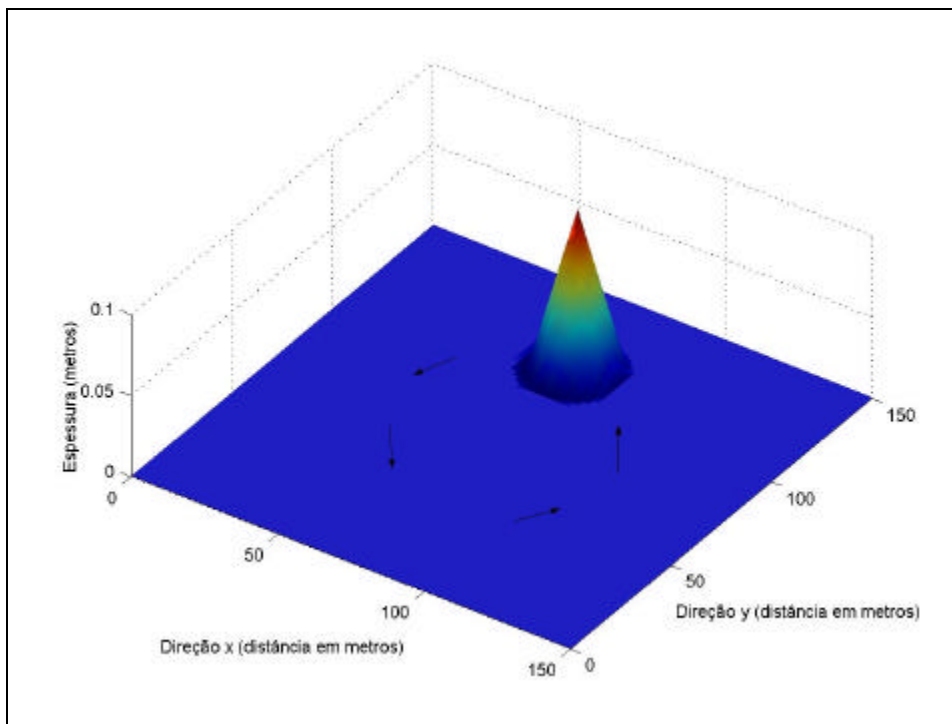


Figura 3.2.2.4.1. Distribuição inicial de espessura.

É importante ressaltar que no experimento realizado nesta etapa do trabalho foi avaliada a eficiência de um sistema de transporte, e não de um esquema numérico, como nos testes de MOLENKAMP (1968).

Nas simulações com o modelo NICOIL foram utilizados filtros, como o limiar de detecção visual por exemplo, a partir do qual considera-se que não há mais óleo na superfície da água para ser transportado. Por esse motivo, resolveu-se estimar uma

curva de desempenho do sistema, ao invés de aplicar uma solução analítica para avaliação da estabilidade, convergência e consistência do esquema numérico.

As simulações realizadas neste experimento objetivaram a obtenção da relação ótima entre a variação de massa (Massa final / massa inicial) e o número de pontos discretos necessários para tratar uma mancha de constituintes.

Em cada uma destas simulações, manchas de diferentes diâmetros foram advectadas em um campo de velocidade hipotético invariante no tempo, radial e de sentido anti- horário, como pode ser observado na Figura 3.2.2.4.2.

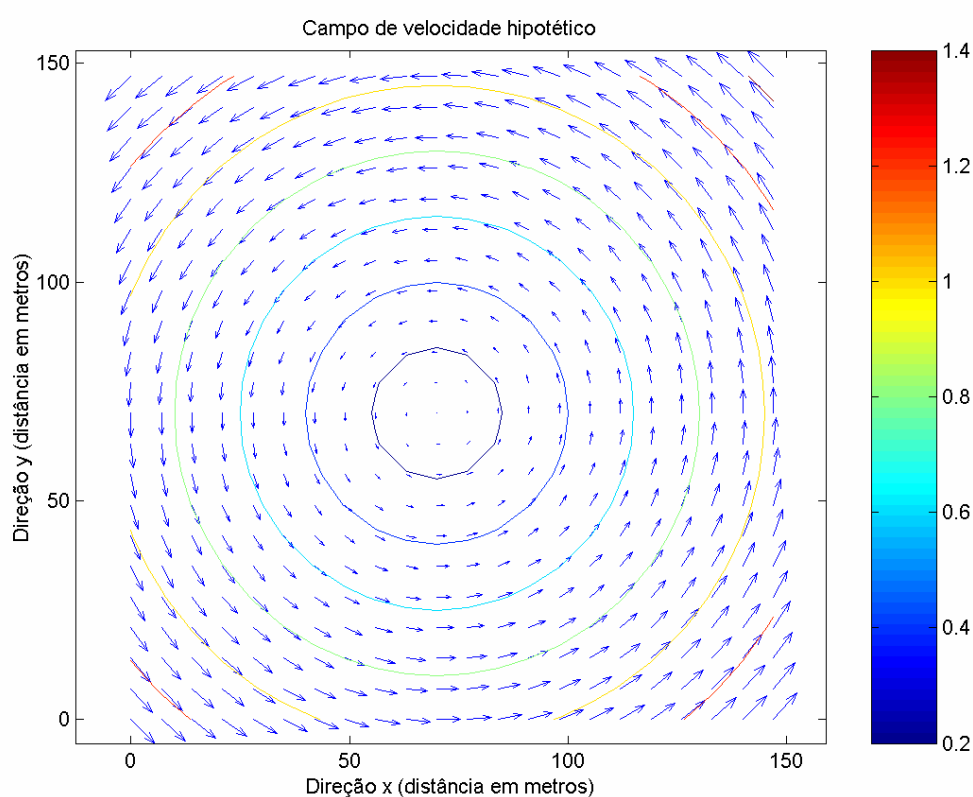


Figura 3.2.2.4.2. Campo de velocidade hipotético.

A dimensão da grade utilizada nas simulações foi de 150 metros x 150 metros, e os diâmetros utilizados em cada uma dos casos foram: Caso A - 28 metros, Caso B - 32 metros e Caso C - 36 metros.

Em cada uma das simulações, simulou-se o transporte da mancha de constituintes utilizando resoluções espaciais referentes à sua discretização em um intervalo de 5 a 55 pontos, de 10 em 10. Ou seja, em cada simulação, a mancha foi

advectada 6 vezes, em grades de resoluções diferentes. E para cada uma destas 6 vezes, a variação de massa entre os instantes iniciais e finais do transporte foi calculada.

Na Figura 3.2.2.4.3 podem ser observados os resultados das três simulações, diferenciados em cores. Nota-se que todos os casos apresentaram a mesma tendência, com valores de variação de massa mais altos quando da discretização das manchas em menos pontos, e valores de variação de massa mais baixos quando da discretização em mais pontos.

Observou-se também na Figura 3.2.2.4.3, uma diferença entre os valores de variação de massa referentes à advecção de manchas de diferentes diâmetros discretizadas em um mesmo número de pontos.

Esta diferença, acentuada quando da discretização em um número menor de pontos, pode ser atribuída ao fato de que, a mancha de maior diâmetro foi advectada por uma região do campo de velocidade onde havia uma maior variação de intensidade do que a região do campo de velocidade que advectou a mancha de menor diâmetro. Como o campo de velocidade utilizado no experimento foi um campo radial, e a mancha estava inicialmente localizada entre o centro da grade, onde a velocidade era praticamente nula, e o extremo da grade, onde a velocidade era de 1m/s, quanto maior o diâmetro da mancha, maior a variação de intensidade de velocidade correspondente.

Além disso, somado a este fato, utilizou-se um valor fixo de velocidade de fase equivalente a 1m/s (valor máximo de velocidade de transporte), para o cálculo da discretização temporal, de acordo com o critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Levi (CFL), o que acabou por resultar nessa diferença de valores de variação de massa entre os diâmetros.

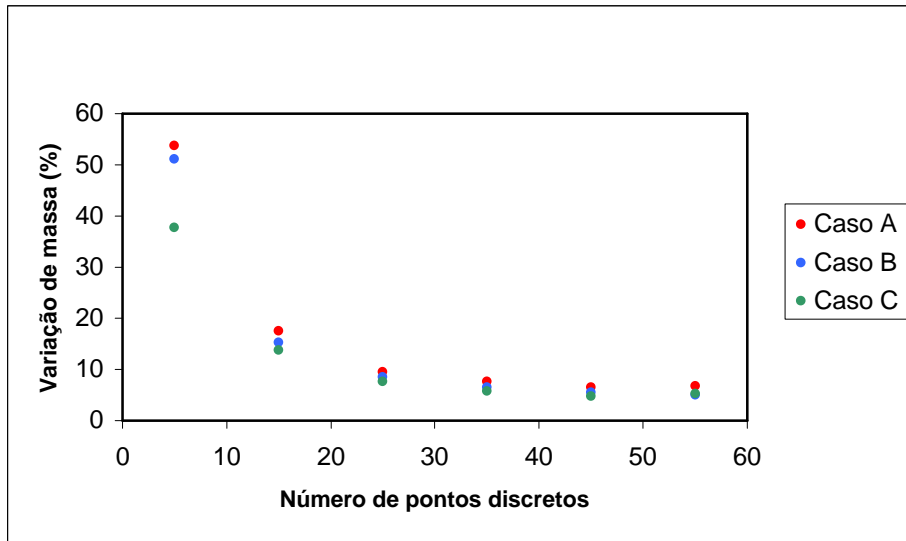


Figura 3.2.2.4.3. Variação de massa da mancha de óleo x Número de pontos discretos.

Aos resultados das três simulações realizadas neste experimento, uma curva exponencial foi ajustada utilizando o método de regressão exponencial, como está representado na Figura 3.2.2.4.4.

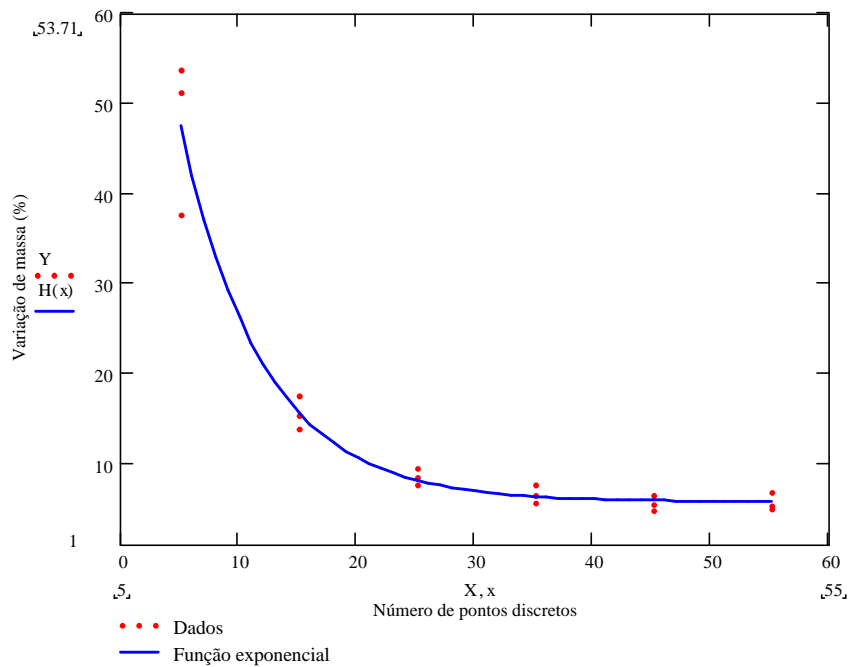


Figura 3.2.2.4.4. Ajuste da curva exponencial aos resultados do experimento.

A equação da curva ajustada aos dados é:

$$f(x) = 85,4 \cdot e^{-0,14x} + 5,7 \quad (\text{Equação 3.2.2.4.1})$$

Analisando-se os resultados do ajuste desta função, observou-se que a partir de 25 pontos discretos, a curva, da esquerda para a direita do gráfico, começou a apresentar valores menores de variação de massa da mancha de óleo (Figura 3.2.2.4.4).

Com a utilização de um número grande de pontos, próximo a 55 por exemplo, a variação de massa foi equivalente a cerca de 5,7%, e com a utilização de 25 pontos, a variação de massa foi de 8,1%.

Como o objetivo era a determinação do número mínimo de pontos capaz de resolver com eficiência uma mancha de óleo no decorrer do transporte, o escolhido a partir desta análise, foi o equivalente a 25 pontos discretos.

A determinação do número mínimo de pontos, em função de uma variação de massa definida, proporcionou um maior controle sobre o sistema de modelagem de transporte.

A obtenção deste resultado permitiu a definição da resolução das sub-grades (adaptativas) a serem implementadas, em determinados instantes de integração, no algoritmo adaptativo do sistema de transporte de óleo NICOIL. Ou seja, independentemente da dimensão da mancha de óleo, ficou estabelecido que esta deveria ser resolvida em no mínimo 25 pontos, possibilitando que a definição da resolução espacial das diferentes sub-grades pudesse ocorrer durante a simulação numérica.

3.3. Campo de correntes a ser utilizado no experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo de transporte de óleo NICOIL

Para simular o transporte de constituintes em corpos d'água é necessário o conhecimento das condições hidrodinâmicas do meio (o comportamento do campo de correntes) e dos ventos que atuam na região.

No segundo experimento realizado neste trabalho apresentado no capítulo 4, optou-se por utilizar um campo de correntes em escala realística gerado pelo Laboratório de Modelagem de Processos Marinhos e Atmosféricos (LAMMA) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) a partir da aplicação do modelo hidrodinâmico *Princeton Ocean Model* (POM)*¹, desenvolvido por BLUMBERG e MELLOR (1983), à região da Baía de Campos.

O campo hidrodinâmico extraído da simulação com o POM corresponde à camada superficial do oceano e abrange a região entre as latitudes de 21° e 22° 30'S e as longitudes de 39° 50' e 41° 15'W, como pode ser observado na Figura 3.2.2.5.1. Trata-se de uma região onde a circulação é fortemente influenciada pelo vento, o que é levado em conta pelo modelo hidrodinâmico.

Para simplificar este experimento, a contribuição direta do vento no transporte dos constituintes não foi considerada, e apenas um tempo da simulação hidrodinâmica foi selecionado, ou seja, utilizou-se um escoamento permanente.

A escolha da localização inicial da mancha de constituintes a ser transportada, foi realizada com base na análise dos campos hidrodinâmico e de divergência, calculado a partir do campo hidrodinâmico, apresentado na Figura 3.2.2.5.2.

O ponto escolhido encontra-se posicionado em 21° 42' 2''S de latitude e 40° 18' 2''W de longitude, próximo à região de máxima convergência. O intuito era que, de acordo com o sentido do escoamento, a mancha inicialmente localizada neste ponto fosse deslocada no decorrer da simulação para a região de maior deformação do escoamento, sendo significativamente influenciada pelo transporte.

*¹ – O modelo hidrodinâmico POM é descrito no Apêndice C.

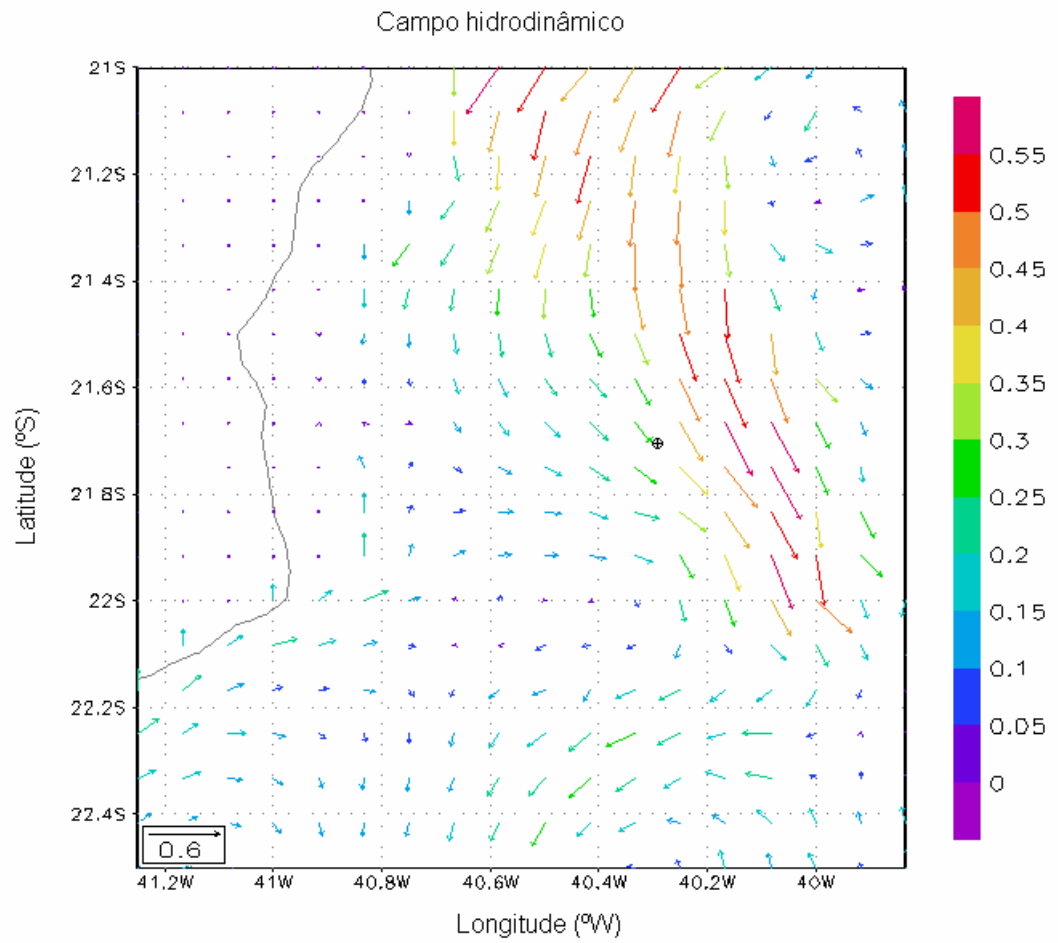


Figura 3.2.2.5.1. Campo hidrodinâmico (m/s).

(⊕ - Localização inicial da mancha de óleo)

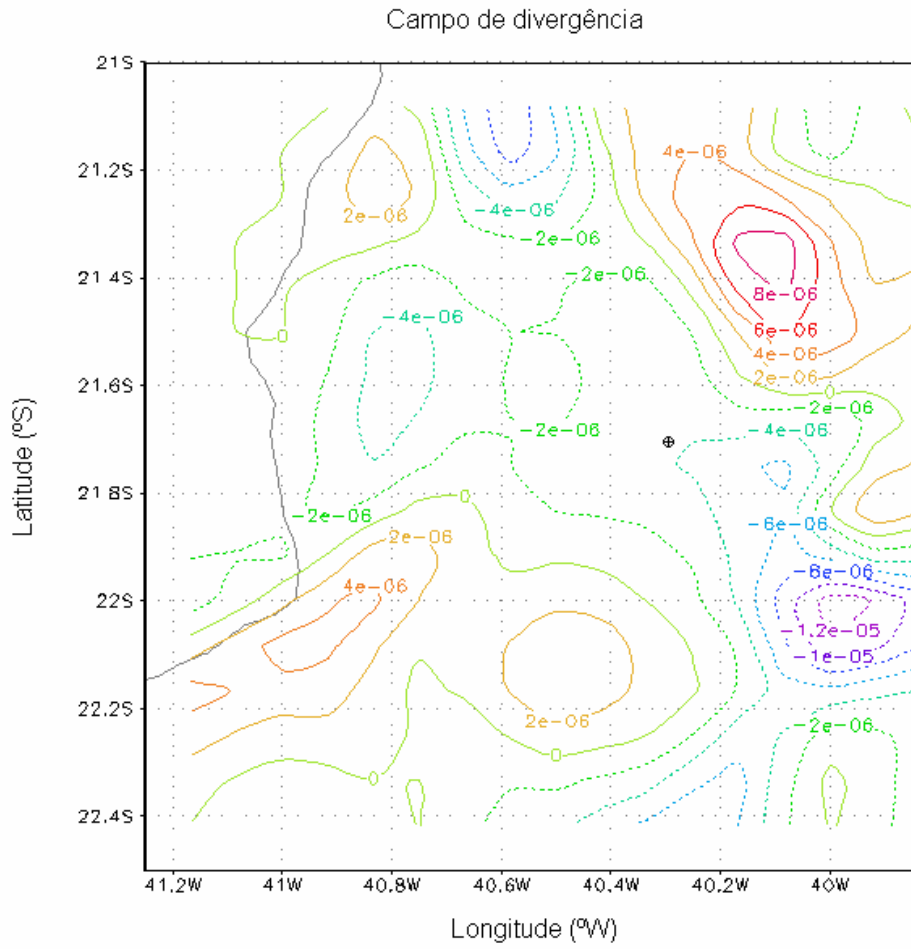


Figura 3.2.2.5.2. Campo de divergência (s^{-1}).

(\oplus - Localização inicial da mancha de óleo)

4. Experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo de transporte de óleo NICOIL

O segundo experimento realizado neste trabalho foi composto por três simulações utilizando-se o modelo de transporte de óleo NICOIL:

- Simulação I – modelagem com uma grade de baixa resolução (grade base) cobrindo todo o domínio;
- Simulação II – modelagem com uma grade de alta resolução (grade fina) cobrindo todo o domínio.
- Simulação III – modelagem com o algoritmo de grade adaptativa;

Este experimento foi realizado para viabilizar a análise do desempenho do algoritmo adaptativo de transporte desenvolvido neste trabalho (correspondente à simulação III) em comparação às outras duas simulações, tanto do ponto de vista do custo computacional, quanto do desempenho do sistema computacional no que se refere à variação de massa da mancha de óleo.

De forma a possibilitar esta comparação entre as três simulações, todas foram conduzidas em uma mesma plataforma computacional, com o processador AMD Athlon (TM) XP 2000, com 1,26 GHz e 256 MB de RAM. E o compilador utilizado para a realização das modelagens foi o Compaq Visual Fortran 6.5.

Para simplificar o experimento, o processo de difusão não foi considerado nas modelagens, assim como os efeitos dos processos de transformação que o óleo sofre no meio marinho.

Nos três casos, simulou-se um vazamento de óleo na região da Bacia de Campos, utilizando-se um valor hipotético de volume de óleo derramado de 30.000 metros cúbicos, o que resultou em uma mancha de óleo com espessura inicial máxima de 0,0052 metros.

A dimensão do domínio espacial utilizado neste experimento foi de 157.420 metros na direção x, e de 166.680 metros na direção y. E como já descrito no capítulo 3, seção 3.2.2.5, utilizou-se um campo de correntes referente a um tempo da simulação hidrodinâmica realizada pelo LAMMA/UFRJ com o modelo POM, correspondente à

camada superficial do oceano, e o ponto referente à localização inicial da mancha de óleo encontrava-se posicionado em $21^{\circ} 42' 2''\text{S}$ de latitude e $40^{\circ} 18' 2''\text{W}$ de longitude.

4.1. Simulação I - Modelagem de transporte com grade de baixa resolução (grade base)

Na simulação I realizou-se a modelagem de transporte de óleo com uma grade de baixa resolução cobrindo todo o domínio.

O objetivo é utilizar nesta simulação a mesma discretização espacial que a apresentada pela grade base utilizada na simulação de modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa (Simulação III).

A resolução espacial da grade utilizada na simulação I foi portanto equivalente a de 480 metros, sendo a grade resolvida em 330×349 pontos discretos em x e y , respectivamente. O campo hidrodinâmico utilizado nesta modelagem foi o originalmente gerado pela simulação com o modelo hidrodinâmico POM, interpolado linearmente de 9260m para 480 metros.

O tempo de integração da simulação I foi de 37 horas, sendo que no seu início a mancha de óleo encontrava-se discretizada em 6×6 pontos.

Nas Figuras 4.1.1 e 4.1.2 pode ser observado o resultado desta simulação, em visão geral e em detalhe, respectivamente. Nestas figuras, a mancha de óleo está representada desde a sua posição inicial até a sua posição final (após 37 horas de integração).

Observou-se o deslocamento da mancha de óleo de acordo com a hidrodinâmica da região, que apresenta um fluxo predominante rumo sul relativo à Corrente do Brasil. Observou-se ainda que a forma da mancha, logo após a primeira hora de integração, já apresentava-se bastante arredondada, e que no decorrer do processo de transporte pela corrente, havia sofrido além da deformação, uma leve rotação (Figuras 4.1.1 e 4.1.2).

Na simulação I, a mancha de óleo ao final do transporte encontrava-se entre as latitudes de $22^{\circ} 6'\text{S}$ e $22^{\circ} 8' 24''\text{S}$ e as longitudes de $40^{\circ} 6'\text{W}$ e $40^{\circ} 8' 24''\text{W}$.

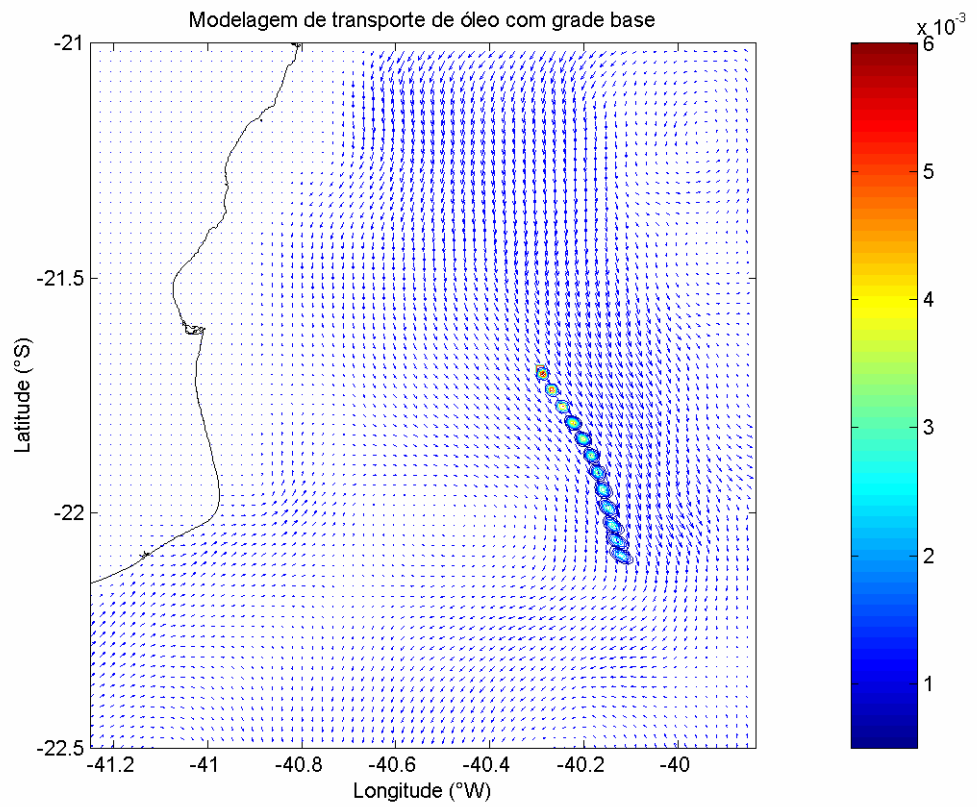


Figura 4.1.1. Modelagem de transporte de óleo com grade base
– Espessura de óleo em metros e escoamento.

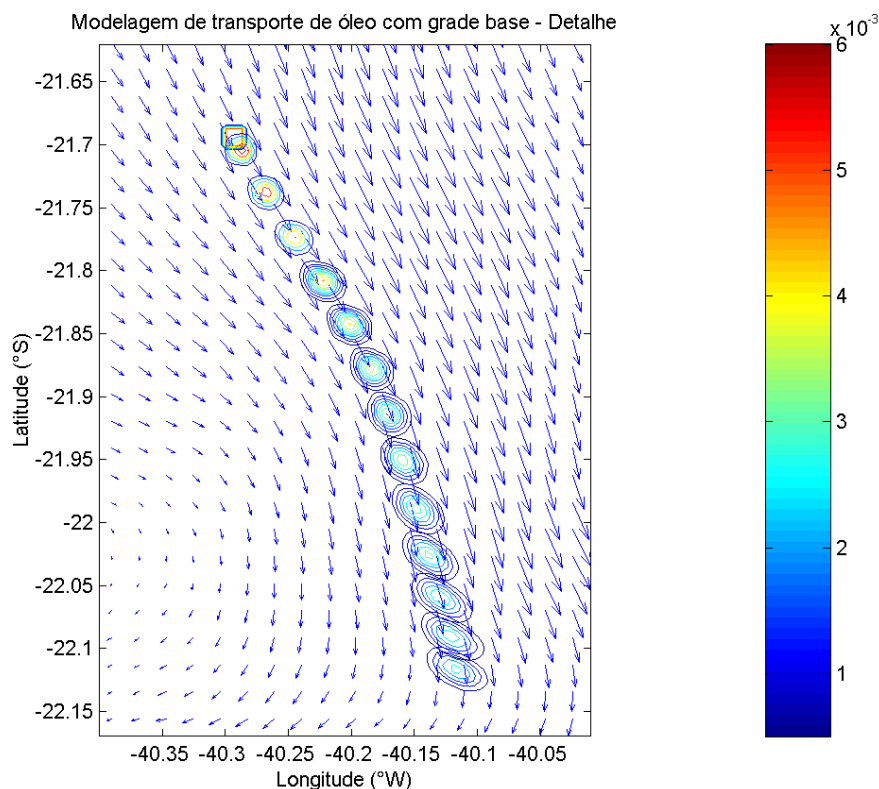


Figura 4.1.2. Modelagem de transporte de óleo com grade base – Detalhe
– Espessura de óleo em metros e escoamento.

Na Figura 4.1.3 está representada uma curva de variação de massa da mancha de óleo (Massa final / massa inicial) relativa ao transporte x tempo de integração.

O cálculo de variação da massa na simulação I foi realizado nos seguintes instantes de tempo de integração: 1h, 4h, 7h, 10h, 13h, 16h, 19h, 22h, 25h, 28h, 31h, 34h e 37h; comparando-se a massa da mancha de óleo após 1h de integração com a massa correspondente ao início da integração, a massa da mancha de óleo após 4h de integração com a massa correspondente à 1h de integração, e assim por diante.

Esses instantes foram selecionados a partir da realização da simulação III, correspondente à modelagem com o algoritmo adaptativo, apresentada no capítulo 4 seção 4.3. Para possibilitar a comparação entre os dois casos, optou-se por utilizar os mesmos momentos de integração em que, na simulação III, houve a necessidade de adaptação de uma nova sub-grade.

Na Figura 4.1.3 observa-se valores de variação de massa da mancha de óleo relativa ao transporte na simulação I entre -10,7% e 17,2%.

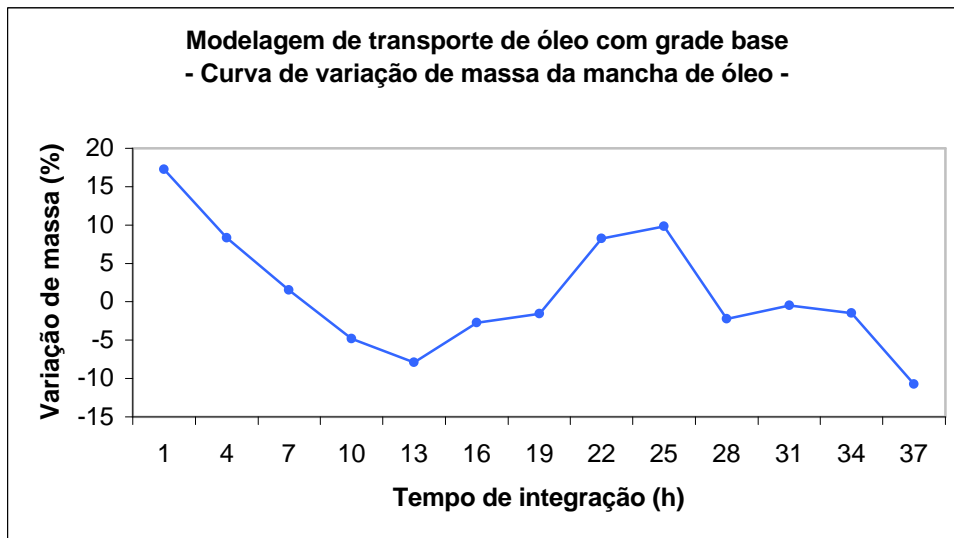


Figura 4.1.3. Modelagem de transporte de óleo com grade base
 – Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.

Na simulação relativa à modelagem de transporte com grade base, o tempo de processamento gasto em 37 horas de integração foi de 38,8 segundos.

4.2. Simulação II - Modelagem de transporte com grade de alta resolução (grade fina)

Na simulação II realizou-se a modelagem de transporte de óleo com uma grade de alta resolução (grade fina) cobrindo todo o domínio.

O objetivo é utilizar nesta simulação a mesma discretização espacial que a apresentada pela grade de maior resolução utilizada na simulação III, referente à modelagem com o algoritmo adaptativo de transporte, apresentada no capítulo 4, seção 4.3.

A resolução espacial utilizada foi portanto de 96 metros, sendo a grade fina resolvida em 1.637 x 1.733 pontos discretos em x e y, respectivamente.

Para a realização da simulação II, o campo de correntes originalmente gerado pela simulação com o modelo hidrodinâmico POM foi interpolado de 9260m para 96 metros, através do método de interpolação linear (vide seção 3.2.2.2.2).

O tempo de integração da simulação com grade fina foi de 37 horas, sendo que no seu início a mancha de óleo encontrava-se discretizada em 25 x 25 pontos*¹.

Nas Figuras 4.2.1. e 4.2.2. podem ser observados os resultados desta simulação em visão geral e em detalhe, respectivamente. Nestas figuras, a mancha de óleo está representada desde a sua posição inicial até a sua posição final (após 37 horas de integração).

Observou-se o deslocamento da mancha de óleo de acordo com a hidrodinâmica da região, que apresenta um fluxo predominante rumo sul relativo à Corrente do Brasil. Observou-se ainda a rotação e deformação sofrida pela mancha à medida que era transportada pelas corrente, e que ao final do transporte encontrava-se entre as latitudes de 22° 6'S e 22° 8' 24''S e as longitudes de 40° 6'W e 40° 8' 24''W (Figuras 4.2.1 e 4.2.2).

*¹ – Número mínimo de pontos discretos utilizado na resolução de uma mancha de óleo, estimado a partir do experimento descrito no capítulo 3, seção 3.2.2.4. E portanto, número utilizado em todas as sub-grades adaptadas da simulação referente à modelagem de transporte com grade adaptativa.

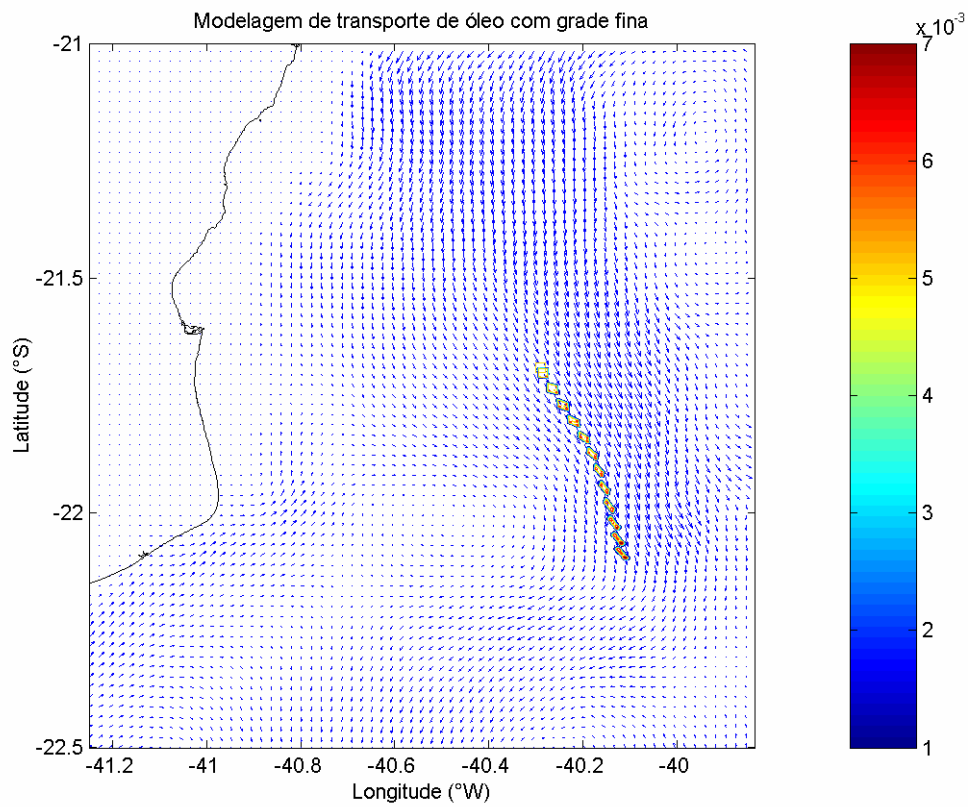


Figura 4.2.1. Modelagem de transporte de óleo com grade fina
– Espessura de óleo em metros e escoamento.

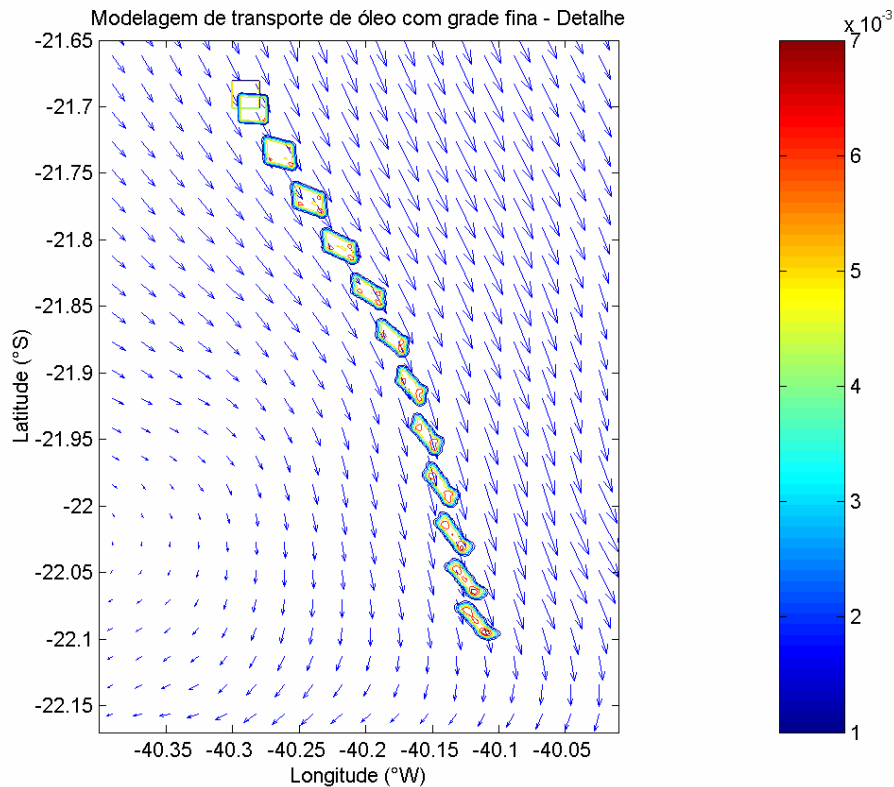


Figura 4.2.2. Modelagem de transporte de óleo com grade fina – Detalhe
 – Espessura de óleo em metros e escoamento.

Na Figura 4.2.3. está representada uma curva de variação de massa da mancha de óleo (Massa final / massa inicial) relativa ao transporte x tempo de integração.

O cálculo de variação da massa na simulação II foi realizado nos seguintes instantes de tempo de integração: 1h, 4h, 7h, 10h, 13h, 16h, 19h, 22h, 25h, 28h, 31h, 34h e 37h; comparando-se a massa da mancha de óleo após 1h de integração com a massa correspondente ao início da integração, a massa da mancha de óleo após 4h de integração com a massa correspondente à 1h de integração, e assim por diante.

Esses instantes foram selecionados a partir da realização da simulação III, correspondente à modelagem com o algoritmo adaptativo, apresentada no capítulo 4, seção 4.3. Para possibilitar a comparação entre os dois casos, optou-se por utilizar os mesmos momentos de integração em que, na simulação III, houve a necessidade de adaptação de uma nova sub-grade.

Na Figura 4.2.3, observa-se os valores de variação de massa da mancha de óleo relativa ao transporte na simulação utilizando grade fina, entre -11,2% e 8,4%.

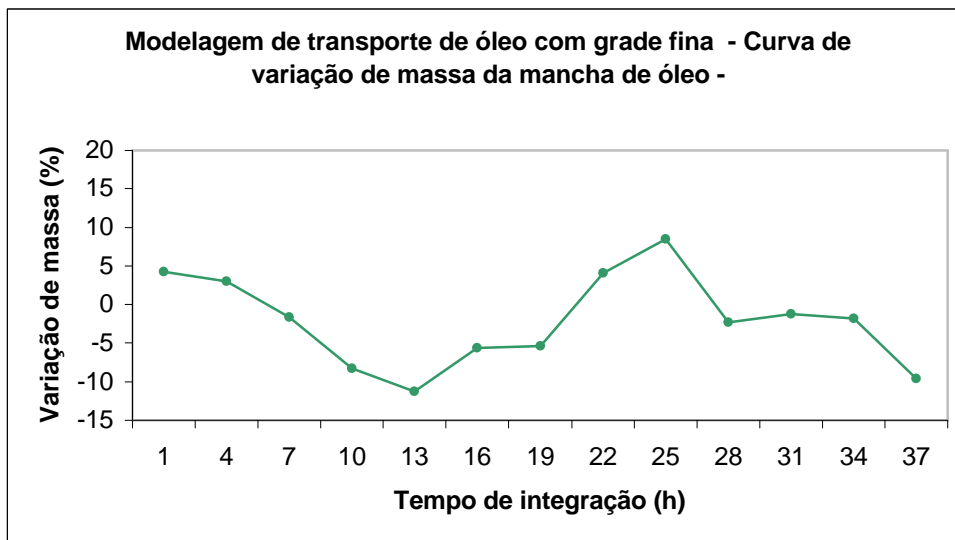


Figura 4.2.3. Modelagem de transporte de óleo com grade fina
– Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.

Na simulação relativa à modelagem de transporte com grade fina, o tempo de processamento gasto em 37 horas de integração foi de 23.437 segundos.

4.3. Simulação III - Modelagem de transporte com o algoritmo de grade adaptativa

Na simulação III realizou-se a modelagem de transporte de óleo com o algoritmo de grade adaptativa desenvolvido neste trabalho. Nesta, foram utilizados dois critérios para a determinação dos instantes em que o processo de adaptação de grade deveria ocorrer: o aumento ou diminuição da dimensão da mancha em mais de 20% (limite arbitrário); e a cada intervalo de três horas de integração.

Na realidade, este método adaptativo de transporte foi desenvolvido para realizar a adaptação de uma nova grade em função da variação de dimensão da mancha de óleo. Mas, como a intenção neste experimento era testar o método, impôs-se que mesmo que a deformação da mancha não fosse suficiente para implicar em uma adaptação de grade, que esta deveria ocorrer de três em três horas.

Para a realização da simulação III, o campo de correntes originalmente gerado pela simulação com o modelo hidrodinâmico POM com resolução espacial de 9260m foi interpolado, através do método de interpolação linear (vide seção 3.2.2.2), para 480 metros, resolução da grade base a ser utilizada. Entende-se por grade base, a grade de baixa resolução que cobre todo o domínio espacial no início da simulação, que neste caso foi composta por 330 x 349 pontos discretos em x e y, respectivamente.

O tempo de integração da simulação III foi de 37 horas, sendo que no seu início a mancha de óleo encontrava-se distribuída em 6 x 6 pontos discretos da grade base nas direções x e y.

Nas Figuras 4.3.1 e 4.3.2 pode ser observado o resultado da simulação III, onde foram adaptadas 13 grades, em visão geral e em detalhe, respectivamente. Encontram-se representados nestas figuras: a espessura da mancha de óleo nos instantes iniciais e finais de transporte em cada sub-grade adaptada; o posicionamento das sub-grades adaptadas e o campo de velocidade de correntes.

Observou-se o deslocamento da mancha de óleo de acordo com a hidrodinâmica da região, que apresenta um fluxo predominante rumo sul relativo à Corrente do Brasil. Observou-se ainda a rotação e deformação sofrida pela mancha à medida que era transportada pela corrente, e que ao final do transporte encontrava-se entre as latitudes de 22° 6'S e 22° 8' 24''S e as longitudes de 40° 6'W e 40° 8' 24''W (Figuras 4.3.1 e 4.3.2).

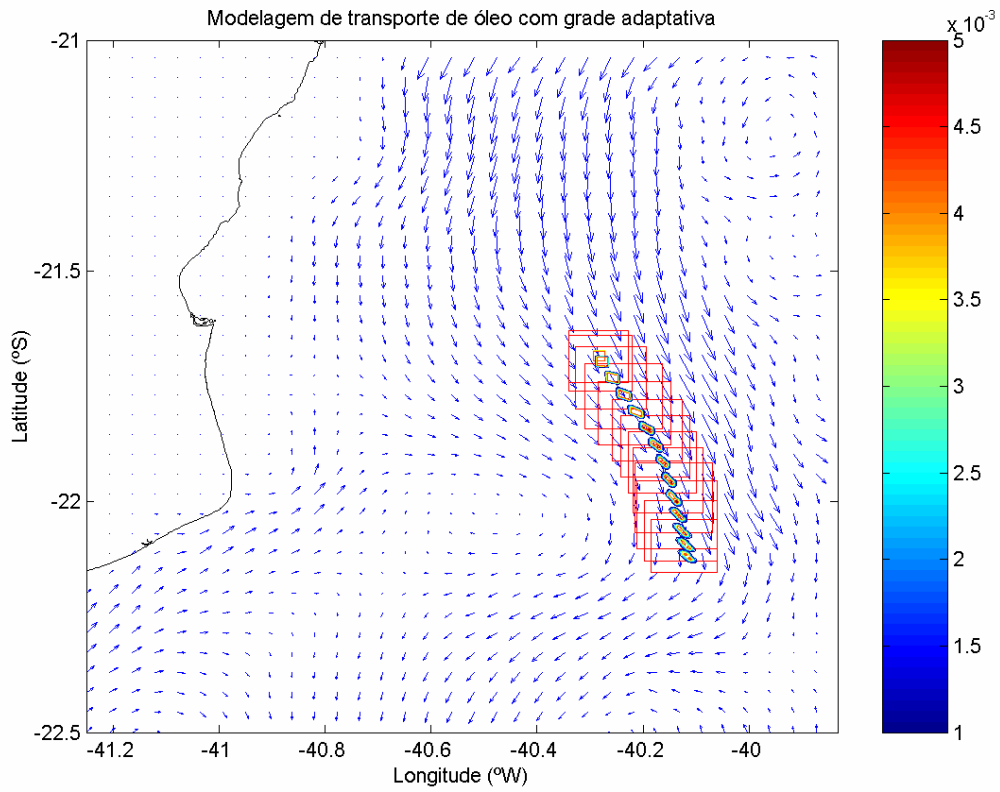


Figura 4.3.1. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa

– Espessura de óleo em metros, posição das sub-grades adaptadas e escoamento.

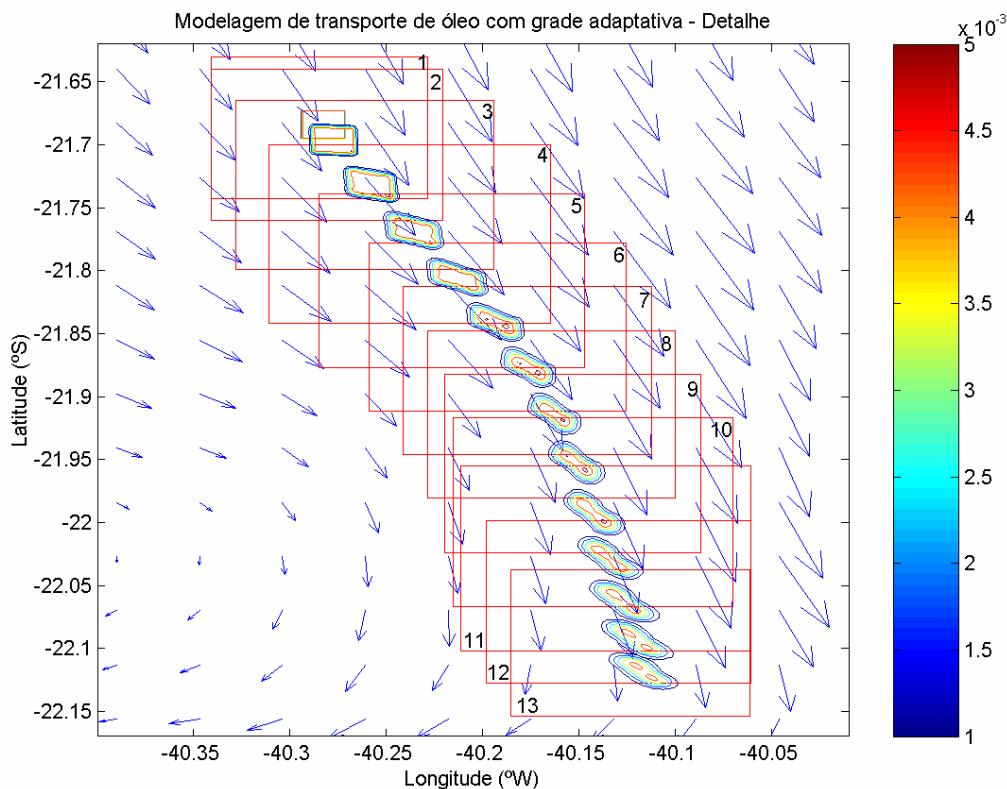


Figura 4.3.2. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Detalhe – Espessura de óleo em metros, posição das sub-grades adaptadas e escoamento.

Na Tabela 4.3.1 estão apresentadas as informações básicas referentes à todas as sub-grades adaptadas e ao transporte associado a elas.

No Apêndice D, são encontradas as figuras referentes ao transporte em cada uma das sub-grades adaptadas separadamente.

Nesta simulação referente à modelagem com o algoritmo adaptativo de transporte, observou-se uma única adaptação de grade devida à variação de dimensão da mancha, no caso um aumento de 24% (de 2.400 para 2.976 metros (vide tabela 4.3.1)), após a primeira hora de integração. Depois disso, as adaptações ocorreram de três em três horas como foi determinado no início da simulação.

Esta necessidade de adaptação de grade devida à variação de dimensão da mancha logo após a primeira hora de simulação, parece estar associada à deformação da mancha de óleo quando transportada na Sub-grade 1, pois é nesta que se observa a maior diferença entre as formas da mancha antes e depois do transporte; uma vez que no início da simulação, a mancha, distribuída em 6 x 6 pontos discretos nas direções x e y, era quadrangular.

Como os campos de velocidade de corrente relativos às duas primeiras sub-grades adaptadas, apresentaram-se bastante parecidos no que se refere às variações de intensidade, esta variação de dimensão da mancha em mais de 20% parece não estar relacionada ao campo de velocidade, pois senão o mesmo teria ocorrido durante o transporte na Sub-grade 2.

A partir da análise da Tabela 4.3.1, referente às informações a respeito de cada uma das sub-grades adaptadas, observa-se que a resolução espacial mais baixa utilizada pelo algoritmo adaptativo de transporte foi de 193,7 metros (Sub-grade 11), enquanto a mais alta foi de 96 metros (Sub-grade 1), resolução selecionada para resolver a grade implementada na simulação II.

A sub-grade composta pelo maior número de pontos de grade em x e y durante toda a simulação foi a Sub-grade 1, com 131 x 131 pontos, e resolução espacial de 96 metros, enquanto a composta pelo menor número de pontos de grade foi a Sub-grade 13, com 78 x 73 pontos em x e y respectivamente, e resolução de 178,5 metros.

Apesar de a Sub-grade 11 apresentar a resolução espacial mais baixa durante toda a simulação em comparação com as outras sub-grades, esta não apresentou o menor número de pontos de grade em x e y. Isto é ocasionado devido às diferentes dimensões de cada uma das sub-grades adaptadas, dimensões estas calculadas com base na maior velocidade de corrente existente na região aonde a mancha de óleo que irá ser transportada está localizada, e na dimensão desta mancha.

Tabela 4.3.1. Informações básicas das sub-grades adaptadas durante a simulação III.

	Conservação de massa (%) – Interpolação	Dimensão da mancha (metros)	Resolução espacial da grade (metros)	Velocidade máxima na região da mancha (m/s)	Dimensão da grade em x e y (metros)	Número de pontos da grade em x e y	Intervalo de horas de simulação	Conservação de massa (%) – Transporte
Sub-grade 1	- 2,0 x 10 ⁻⁷	2.400	96	0,42	12.480 x 12.480	131 x 131	0 a 1	3,5
Sub-grade 2	- 5,0 x 10 ⁻²	2.976	119,0	0,43	13.440 x 13.440	113 x 113	1 a 4	1,4
Sub-grade 3	0,4	3.571	142,8	0,46	14.880 x 14.880	105 x 105	4 a 7	-1,6
Sub-grade 4	-1,4	3.856	154,2	0,49	16.320 x 15.840	106 x 103	7 a 10	-8,3
Sub-grade 5	-----	3.856	154,2	0,48	15.360 x 15.360	100 x 100	10 a 13	-11,0
Sub-grade 6	-2 ,7	4.011	160,4	0,45	14.880 x 14.880	93 x 93	13 a 16	-5,6
Sub-grade 7	2,1	3.850	154,0	0,44	14.400 x 14.880	94 x 97	16 a 19	-4,9
Sub-grade 8	-3,0	4.004	160,1	0,43	14.400 x 14.880	90 x 93	19 a 22	5,1
Sub-grade 9	-----	4.004	160,1	0,45	14.880 x 15.840	93 x 99	22 a 25	8,0
Sub-grade 10	0,3	4.485	179,4	0,48	16.320 x 16.800	91 x 94	25 a 28	-4,1
Sub-grade 11	-1,7	4.844	193,7	0,46	16.800 x 16.320	87 x 85	28 a 31	-0,1
Sub-grade 12	-2,3	4.650	186,0	0,40	15.360 x 14.400	83 x 78	31 a 34	-3,6
Sub-grade 13	1,9	4.464	178,5	0,35	13.920 x 12.960	78 x 73	34 a 37	-10,7

Na Tabela 4.3.1 é possível observar também a variação de massa da mancha de óleo relacionada ao processo de interpolação das matrizes de dados de espessura na simulação com grade adaptativa, com valores entre -3% e 2,1%.

Na Figura 4.3.3 está representada a curva de variação de massa da mancha de óleo (Massa final / massa inicial) relativa ao transporte em cada sub-grade adaptada x tempo de integração. Este cálculo de variação da massa foi realizado comparando-se os instantes inicial e final do transporte em cada sub-grade, nos seguintes instantes de tempo de integração: 1h, 4h, 7h, 10h, 13h, 16h, 19h, 22h, 25h, 28h, 31h, 34h e 37h.

Com relação à este cálculo, foram registrados valores oscilando entre -11% e 8%, também representados na Tabela 4.3.1.

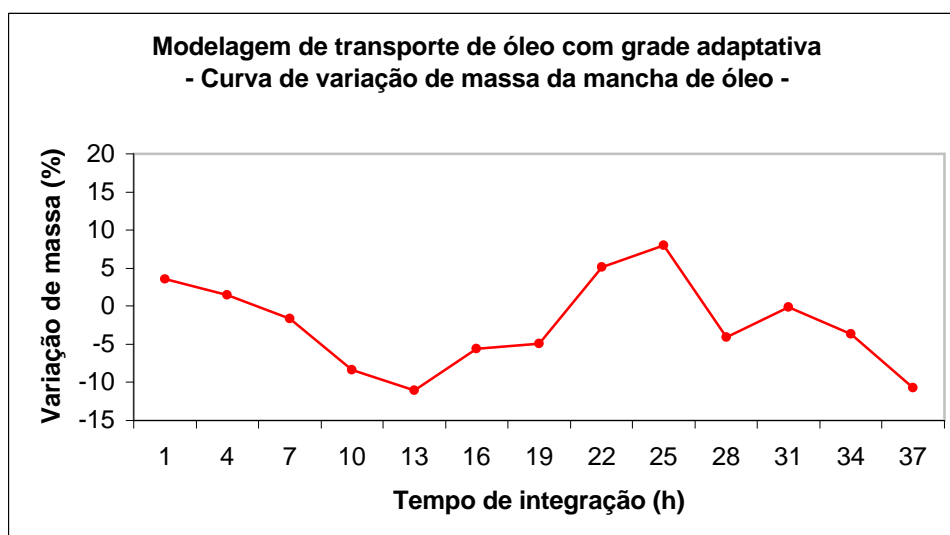


Figura 4.3.3. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.

Como na simulação relativa à modelagem de transporte com grade adaptativa, o procedimento de inicialização somado aos procedimentos referentes às subrotinas de Localização da mancha, Velocidade na região da mancha e Estimativa da sub-grade corresponderam a 1% do tempo de processamento, optou-se por representá-los juntos no gráfico da Figura 4.3.4.

Na simulação III, o tempo total de processamento gasto foi de 5,8 segundos, dos quais 1% relativos à Inicialização + Subrotina Localização da mancha + Subrotina Velocidade na região da mancha + Subrotina Estimativa da sub-grade, 3% relativos à

Subrotina Velocidade, 11% relativos Subrotina Criação da sub-grade, e 84% relativos à Subrotina Transporte (Figura 4.3.4).

Resumidamente, as três subrotinas que implicam em maior tempo de cálculo referem-se à interpolação dos dados de velocidade (Subrotina Velocidade); à criação da sub-grade, com interpolação dos valores de espessura de óleo e cálculo de variação de massa da mancha de óleo associado à esta interpolação (Subrotina Criação da sub-grade); e ao transporte da mancha de óleo e cálculo de variação de massa associado a este transporte (Subrotina Transporte).

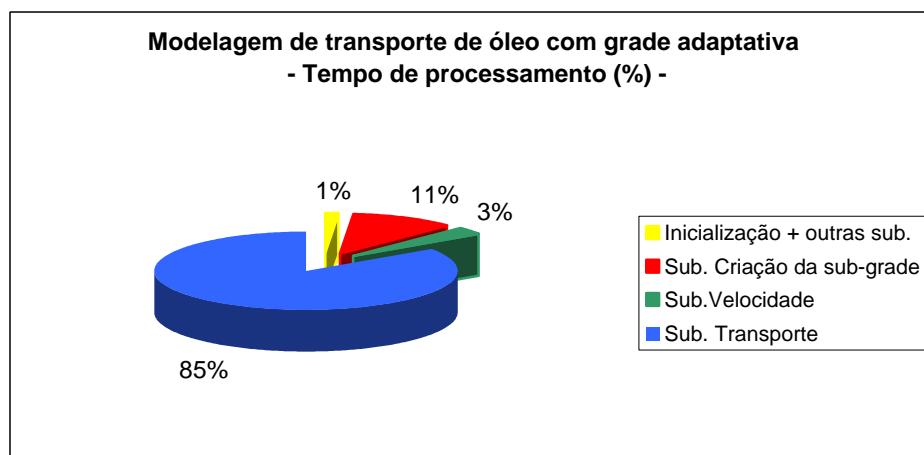


Figura 4.3.4. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Tempo de processamento.

5. Discussão

Experimento realizado para a definição do número de pontos utilizados na discretização de uma mancha de óleo

O experimento realizado (vide capítulo 3, seção 3.2.2.4) com base nos testes de MOLENKAMP (1968), permitiu a definição do número de pontos utilizados na discretização da mancha de óleo na inicialização da modelagem com o algoritmo adaptativo de transporte, e a conseqüente determinação, ao longo da simulação, da resolução espacial de cada uma das sub-grades adaptadas.

A partir dos resultados deste experimento, definiu-se que a mancha de óleo, independentemente de sua dimensão, deveria ser resolvida durante a integração em, no mínimo, vinte e cinco pontos discretos.

Um aspecto das soluções de diferenças finitas para as equações de onda, como é o caso da equação de transporte advectivo-difusivo, é que as ondas calculadas geralmente movem-se mais lentamente que as ondas da solução analítica. Esta é uma falha inerente à maioria das soluções de diferenças finitas e é denominada de erro de fase. Em geral, para um dado passo de tempo, quanto melhor a resolução espacial com relação ao movimento da onda de um extremo a outro da grade, mais próxima será a solução de diferenças finitas da solução verdadeira (WASHINGTON & PARKINSON, 1986).

Segundo WASHINGTON & PARKINSON (1986) se a onda for representada por oito ou mais pontos de grade, ela se moverá com uma velocidade próxima à velocidade real.

É claro que isso vai depender da aproximação de diferenças finitas que se estiver utilizando e de outras variáveis, como os erros de truncamento por exemplo.

Experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo de transporte de óleo NICOIL

Com relação às simulações de modelagem de transporte de óleo I, II e III, apresentadas no capítulo 4, observou-se que nos três casos a mancha de óleo foi deslocada e rotacionada de acordo com a hidrodinâmica da região, localizando-se ao final do transporte entre as latitudes de 22° 6'S e 22° 8' 24"S e as longitudes de 40° 6'W e 40° 8' 24"W (Figuras 4.1.1, 4.1.2, 4.2.1, 4.2.2, 4.3.1 e 4.3.2).

Constatou-se que na simulação I, referente à modelagem de transporte com grade de baixa resolução (grade base), em comparação com os outros dois casos (modelagem com grade adaptativa e com grade fina), a deformação da mancha foi maior, sendo visível logo após a primeira hora de integração. Esta degradação parece estar relacionada à resolução espacial da grade utilizada, conferindo uma representação da mancha no início da integração em apenas 6 x 6 pontos discretos.

Variação de massa

Comparando-se as curvas referentes à variação de massa da mancha de óleo ao longo da integração para as três simulações realizadas, nota-se que todas apresentaram um mesmo padrão (Figura 5.1).

As curvas correspondentes às simulações de modelagem com grade fina (II) e modelagem com grade adaptativa (III) mostraram-se bastante similares como era de se esperar, com valores oscilando entre -11,2% e 8,4% na simulação II, e -11% e 8% na simulação III.

Este intervalo de valores de variação de massa relativo às essas simulações (II e III), foi condizente com o valor de variação de massa registrado no experimento controlado realizado com base nos testes de Molenkamp (1968), onde a variação de massa de uma mancha também resolvida em 25 x 25 pontos discretos, como nestas simulações, transportada em um campo de velocidade hipotético invariante no tempo, foi de 8,1%.

As pequenas diferenças entre as curvas referentes às simulações II e III (Figura 5.1) podem ser atribuídas ao processo de interpolação dos dados de espessura, que se

repete várias vezes durante uma simulação com grade adaptativa, e acaba resultando numa pequena perda ou ganho de massa, devido aos pequenos erros de truncamento associados. Estes valores de variação de massa da mancha de óleo relativos ao processo de interpolação dos dados de espessura foram calculados durante a integração, e variaram entre -3% e 2,1%.

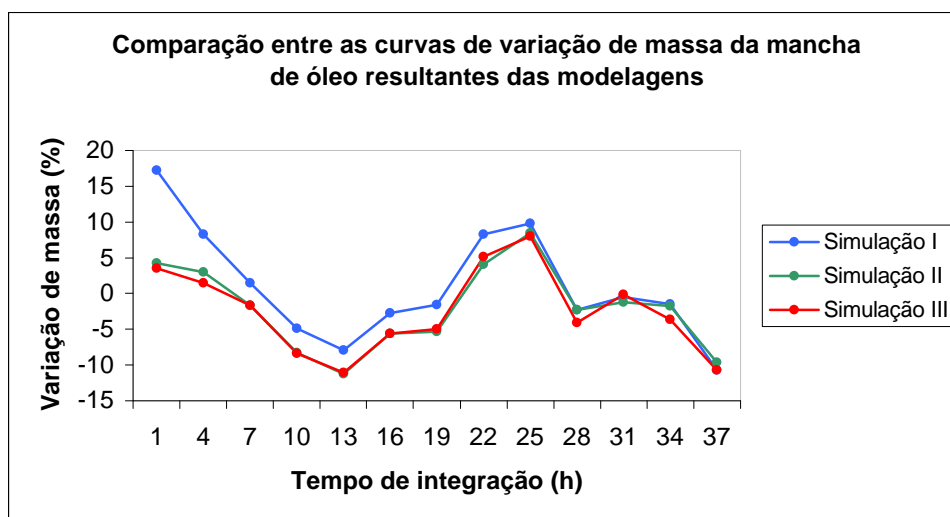


Figura 5.1. Simulações I (grade base), II (grade fina) e III (grade adaptativa) – Curva de variação de massa da mancha de óleo ao longo do tempo de integração.

O aspecto das três curvas (Figura 5.1) parece estar associado principalmente ao padrão do escoamento (às variações de intensidade de velocidade, à rotação e à convergência causada pelo meandramento das correntes) na região percorrida pela mancha.

Nas três simulações, embora o critério de Courant-Friedrichs-Levi tenha sido verificado e respeitado a cada etapa de adaptação de grade, a estabilidade do esquema numérico parece ter sido afetada gerando uma variação de massa bastante significativa.

Nestas simulações foi utilizado um valor fixo de velocidade de fase equivalente a 1m/s para o cálculo da discretização temporal, valor considerado, com base na literatura, como um valor de intensidade de velocidade jamais superado pela Corrente do Brasil (SIGNORINI, 1978; EVANS *et al.*, 1983; SIGNORINI *et al.*, 1989). E o que parece é que, assim como no experimento realizado com base nos testes de MOLENKAMP (1968) apresentado no capítulo 3, seção 3.2.2.4, a utilização de um valor fixo de velocidade de fase para a determinação da discretização temporal, de

acordo com o critério de estabilidade de CFL, associado ao transporte em regiões com gradientes de velocidade, acaba por resultar em variação de massa, pois a taxa de amostragem do esquema numérico varia com o escoamento.

Tempo de processamento

Foram bastante significativas as diferenças encontradas entre as simulações I, II e III, com relação aos resultados dos cálculos de tempo total gasto de processamento, nos respectivos processos.

Na simulação I, referente à modelagem com grade de baixa resolução (grade base), o tempo total de processamento gasto foi de 38,8 segundos; na simulação II, referente à modelagem com grade de alta resolução (grade fina), o tempo total de processamento foi de 23.437 segundos; e na simulação III, referente à modelagem de transporte com grade adaptativa, o tempo total de processamento gasto foi de 5,8 segundos.

Ou seja, o tempo de processamento gasto na simulação relativa à modelagem de transporte com grade adaptativa foi 6,7 vezes menor do que o tempo gasto na simulação relativa à modelagem com grade base, e 4.040 vezes menor do que o tempo gasto na simulação relativa à modelagem com grade fina.

O fato de a simulação com o algoritmo adaptativo de transporte (Simulação III) ter se demonstrado tão econômica computacionalmente em comparação às outras duas simulações, parece estar relacionado à dimensão das sub-grades utilizadas no processo de transporte.

Na simulação III, ao invés de se realizar o transporte em uma grade que abrangia todo o domínio espacial, com dimensões de 157.420 metros na direção x e de 166.680 metros na direção y, como nos casos das modelagens com grade base e fina; o transporte foi realizado em sub-grades ajustadas localmente na região de interesse, com dimensões máximas de 16.800 metros em x e 16.800 metros em y.

A característica dos métodos adaptativos de ajustar grades de resoluções espaciais diferentes em determinadas regiões do domínio, que possam eventualmente se deslocar em função da evolução do constituinte transportado ou de qualquer outra feição de interesse, confere ao processo de modelagem um ganho no que se refere à redução dos custos de cálculo, o que foi confirmado pela realização da Simulação III.

É importante destacar que este desempenho do algoritmo adaptativo de transporte está associado à escala espaço-temporal do experimento realizado, onde a região de transporte efetiva foi pequena em relação ao domínio espacial total utilizado;

e que é de se esperar que o desempenho do algoritmo seja proporcional à relação entre a área das sub-grades adaptadas e a área do domínio espacial total.

6. Conclusões

A aplicação preliminar de uma técnica de grade adaptativa em modelagem de transporte de óleo no mar foi apresentada neste trabalho. E para avaliar o seu desempenho, três simulações foram realizadas e comparadas.

Com relação à análise do desempenho do sistema computacional no que se refere à variação de massa da mancha de óleo, os resultados da simulação com a grade fina (Simulação II), mostraram-se bastante similares aos resultados da simulação realizada com o algoritmo adaptativo de transporte (Simulação III).

Esta similaridade confirmou a capacidade do algoritmo adaptativo desenvolvido neste trabalho de representar a mancha de óleo durante a integração com o mesmo desempenho que em uma modelagem realizada com uma grade de alta resolução (grade fina) cobrindo todo o domínio.

A partir dos resultados desta análise quantitativa de variação de massa relativa ao transporte, conclui-se também que o esquema numérico utilizado não foi muito conservativo em nenhuma das três simulações realizadas, o que sugeriu a necessidade de se testar no modelo de transporte de óleo NICOIL a implementação de outros esquemas numéricos, ou até de outros tipos de grade.

A partir da análise dos resultados relativos ao tempo total de processamento gasto em cada um das três simulações do experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo de transporte de óleo NICOIL, observou-se uma grande economia computacional quando da realização da simulação referente à modelagem com grade adaptativa (Simulação III), principalmente quando comparada com a simulação referente à modelagem com grade fina (Simulação II), onde o tempo gasto foi de 4.040 vezes maior que o gasto na anterior.

Concluiu-se que técnicas adaptativas podem ser implementadas com êxito em modelagem de transporte de óleo, e que a técnica desenvolvida neste trabalho para implementação no modelo NICOIL, apresentou resultados bastantes satisfatórios no que se refere ao custo computacional.

Uma sugestão para um possível aprimoramento do algoritmo adaptativo no futuro, seria que as sub-grades adaptativas fossem representadas por retângulos orientados de acordo com o sentido de máxima velocidade de corrente na região. O que

viria a otimizar ainda mais, do ponto de vista do desempenho em relação ao custo computacional, o processo de modelagem.

Acredita-se que experimentos futuros considerando um escoamento que varie no tempo, considerando o processo de difusão turbulenta, e os processos de decaimento do óleo na água do mar, poderão confirmar o quanto é vantajosa a utilização de técnicas de grades adaptativas no transporte de constituintes na superfície do mar.

7. Referências Bibliográficas

- ABBOTT, M.B, BASCO, D.R., 1989, *Computational Fluid Dynamics – An Introduction for Engineers*. England, Longman Scientific and Technical.
- AL-RABEH, A.H., LARDNER R.W., GUNAY N., 2000, "Gulfspill Version 2.0: a software package for oil spills in the Arabian Gulf", *Environmental Modelling & Software*, v.15, pp. 425-442.
- BERGER, M. J., OLIGER J., 1984, "Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations", *Journal of Computational Physics*, v. 53, pp. 484-512.
- BERGER, M.J. COLELLA P., 1989, "Local Adaptive mesh Refinement for Shock Hydrodynamics", *Journal of Computational Physics*, v. 82, pp. 64-84.
- BELL, J. *et al.*, 1994, "Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws", *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 15, pp. 127–138.
- BLAYO, E., DEBREU L., 1999, "Adaptive Mesh Refinement for Finite-Difference Ocean Models: First Experiments", *Journal of Physical Oceanography*, v. 29, (June), pp. 1239 -1250.
- BLAYO, E., DEBREU L., 2002, *AGRIF: Adaptive Grid Refinement in Fortran*. Rapport technique n^o 0262 - Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes, Montbonnot-St-Martin, France.
- BLUMBERG, A. F., MELLOR, G.L. 1983, "Diagnostic and prognostic numerical circulation studies of the South Atlantic Bight", *Journal of Geophysical Research*, v. 88, pp. 4579-4592.
- CHAO, X., SHANKAR N.J., CHEONG H.F., 2001, "Two- and three-dimensional oil spill model for coastal waters", *Ocean Engineering*, v. 28, pp. 1557-1573.
- DANIEL P., 1996. "Operational forecasting of oil spill drift at Météo-France", *Spill Science & Technology Bulletin*. v. 3, n^o ½, pp. 53-64.
- DAVIS, J.C., 1973, *Statistics and analysis in geology*. Can. Geol. Survey. Joan Willey & Sons.
- DEBREU, L., 2000, *Raffinement Adaptatif de Maillage et Méthodes de Zoom - Application aux Modèles D'Océan*. D.Sc. Dissertation, Université Joseph Fourier, Grenoble, France.

- EVANS, D.L., SIGNORINI, S.R., MIRANDA, L.B., 1983, “A note on the transport of the Brazil Current”, *Journal of Physical Oceanography*, v. 9, pp. 724-738.
- EZER, T., MELLOR L., 1997, “Simulations of the Atlantic Ocean with a free surface sigma coordinate model”, *Journal of Geophysical Research*, v. 102(C7), pp. 15647-15657.
- FAY, J. A., 1971, “Physical processes in the spread of oil on a water surface”. In: *Proceedings of the Joint conference on Prevention and Control of Oil Spills*, pp. 463-467.
- GNOME, 2002. *User's Manual*. Office of Response and Restoration. Hazardous Materials Response Division. National Oceanic and Atmospheric Administration.
- HERRNSTEIN, A., WICKETT M., RODRIGUE G., 2004, “Structured adaptive mesh refinement using leapfrog time integration on a staggered grid for ocean models”, *Ocean Modelling*. Elsevier. In press.
- HOULT, D. P., 1972, Oil spreading on the Sea. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, ed. M. Van Dyke. W. Vincenti & J. Wehausen. Annual Reviews. Inc. Palo Alto, CA. pp. 341-368.
- JIN, X. Y., 1993. *Communications on Hydraulic and Geotechnical Engineering – Quasi-Three-Dimensional Numerical Modeling of Flow and Dispersion in Shallow Water*. In: Report 93-3, Delft University of Technology.
- LEHR, W. *et al.*, 2002, “Revisions of the ADIOS oil spill model”, *Environmental Modelling & Software*, v. 17, pp. 191-199.
- LEONARD B.P., 1979. A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 19, pp. 59-98.
- LIMA, J.A.M., TORRES, A.R., FRAGOSO, M.R., MARTINELLI, M.R., MEHDI, N. 2001, “Oil spill study at Baia de Guanabara, Brazil”. In: *Proceedings of OMAE-20th International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering*.
- MACKAY, D., MATSUGU R. S., 1973, “Evaporation rates of liquid hydrocarbon spills on land and water”, *Can J. Chem. Eng.*, v. 51, pp. 434-439.
- MACKAY, D. *et al.*, 1980. *Oil Spill Processes and Models*. Environmental Impact Control Directorate, Ottawa.

- McCAY, D.F., ROWE J., WHITTIER N., 2003, *Estimation of Natural Resources Damages for 23 Florida Cases Using Modelling of Physical Fates and Biological Injuries*. In: Final report, Applied Science Associates, Florida.
- MOLENKAMP, C.R., 1968, "Accuracy of Finite-Difference Methods Applied to the Advection Equation", *Journal of Applied Meteorology*, v. 7, (April), pp. 160-167.
- REED, M., KNAUSS W., 1988, Development, testing, and verification of an oil spill surf-zone mass-transport model. In: Final Report. MMS 88-0032, OCS Study, Rhode Island.
- REED, M., 1989, The Physical Fates Component of The Natural Resource Damage Assesment Model System, *Oil & Chemical Pollution*, v. 5, pp. 99-123.
- ROSMAN, P.C.C., 1997, *Subsídios para modelagem de sistemas estuarinos*. In: *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos*, v. 3, capítulo 3, Brasil, Associação Brasileira de Recursos Hídricos.
- SHEN H.T., YAPA, P.D., PETROSKY M.E., 1987, "A simulation model for oil slick transport in lakes", *Water Resources Research*, v. 23, 10 (October), pp. 1949-1957.
- SIGNORINI, S.R., 1978, "On the circulation and the volume transport of the Brazil Current between the Cape of São Tomé and Guanabara Bay", *Deep-Sea Research*, v. 25, pp. 481-490.
- SIGNORINI, S.R., MIRANDA, L.B., EVANS, D.L., STEVENSON, M.R., INOSTROZA, H.M., 1989, "Corrente do Brasil: estrutura térmica entre 19° e 25°S e circulação geostrófica", *Bolm. Inst. Oceanogr.*, v. 37(1), pp. 33-49.
- TKALICH, P., HUDA, M.K., GIN, K.Y.H., 2003, "A Multiphase Oil Spill Model". *Journal of Hydraulic Research*, v. 41, No. 2, pp. 115-125.
- TORRES JR, A.R., 1995, *Resposta da ressurgência costeira de Cabo Frio à forçantes locais*. Dissertação de mestrado. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.
- WASHINGTON, W. M., PARKINSON C. L. 1986. *An introduction to three-dimensional climate modeling*. New York, Oxford University Press.

Apêndice A. Esquemas numéricos utilizados no modelo de transporte NICOIL

A equação de transporte advectivo-difusivo no modelo de transporte de óleo NICOIL é resolvida utilizando-se os esquemas numéricos de diferenças finitas *Euler Forward* para o tempo e o esquema CUICKEST (*Cubic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms*) para o espaço.

Esquema numérico Euler Forward

No esquema Euler Forward, o termo avançado no tempo t+1 é calculado usando-se o tempo presente t (Equação A.1).

$$\mathbf{j}_{i,j}^{t+1} = \Delta t \cdot \left[u_{i,j}^t \cdot \frac{(\mathbf{j}_{i+1,j}^t - \mathbf{j}_{i,j}^t)}{\Delta s} + v_{i,j}^t \cdot \frac{(\mathbf{j}_{i,j+1}^t - \mathbf{j}_{i,j}^t)}{\Delta s} \right] + \mathbf{j}_{i,j}^t$$

(Equação A.1)

onde \mathbf{j} = espessura da camada flutuante de óleo;

i e j = pontos de grade nas direções x e y, respectivamente;

u e v = componentes de velocidade da corrente;

Δs = espaçamento de grade;

Δt = passo de tempo.

Esquema numérico CUICKEST (*Cubic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms*)

LEONARD (1979) desenvolveu alguns esquemas numéricos utilizando interpolação *upstream*, baseados na formulação conservativa do volume de controle, onde considera-se o balanço de constituintes no interior do volume.

O método QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*), desenvolvido para resolver fluxos estacionários e o método QUICKEST (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated*

Streaming Terms), para aplicação em fluxos instáveis, são exemplos de esquemas que utilizam interpolação quadrática *upstream*. Já o método CUICKEST (Cubic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms), esquema aplicado no NICOIL, utiliza interpolação cúbica *upstream*.

Trata-se de uma variação curvilínea do método quadrático QUICKEST, que teve a sua formulação apresentada no trabalho de Leonard (1979), adaptada à interpolação cúbica *upstream*, e implementada no NICOIL.

A formulação do esquema numérico CUICKEST está representada na Equação A.2.

$$\mathbf{j}_{i,j}^{n+1} = -K_1 \cdot (u_{i,j} \cdot adu + v_{i,j} \cdot adv) + K_2 \cdot (\mathbf{j}_{i+1,j}^n + \mathbf{j}_{i-1,j}^n + \mathbf{j}_{i,j+1}^n + \mathbf{j}_{i,j-1}^n - 4 \cdot \mathbf{j}_{i,j}^n) + \mathbf{j}_{i,j}^n$$

(Equação A.2)

onde $K_1 = \frac{\Delta t}{6 \cdot \Delta s}$;

$$K_2 = K \cdot \frac{\Delta t}{\Delta s^2};$$

onde K = coeficiente de difusão turbulenta.

Sendo que os valores de *adu* e *adv* na Equação A.2 são modificados de acordo com o sinal da velocidade da corrente:

Para valores de u>0

$$adu = \mathbf{j}_{i-2,j}^n - 6 \cdot \mathbf{j}_{i-1,j}^n + 3 \cdot \mathbf{j}_{i,j}^n + 2 \cdot \mathbf{j}_{i+1,j}^n$$

Para valores de u<0

$$adu = -2 \cdot \mathbf{j}_{i-1,j}^n - 3 \cdot \mathbf{j}_{i,j}^n + 6 \cdot \mathbf{j}_{i+1,j}^n - \mathbf{j}_{i+2,j}^n$$

Para valores de v>0

$$adv = \mathbf{j}_{i,j-2}^n - 6 \cdot \mathbf{j}_{i,j-1}^n + 3 \cdot \mathbf{j}_{i,j}^n + 2 \cdot \mathbf{j}_{i,j+1}^n$$

Para valores de v<0

$$adv = -2 \cdot \mathbf{j}_{i,j-1}^n - 3 \cdot \mathbf{j}_{i,j}^n + 6 \cdot \mathbf{j}_{i,j+1}^n - \mathbf{j}_{i,j+2}^n$$

Apêndice B. Formulações paramétricas dos processos de decaimento de óleo considerados pelo modelo de transporte NICOIL

O modelo de transporte de óleo NICOIL considera em seus cálculos de balanço de massa, os processos de decaimento conhecidos como evaporação, espalhamento e "entranhamento" de óleo na coluna d' água (LIMA *et al.*, 2001). As formulações paramétricas utilizadas nesses cálculos serão apresentadas a seguir:

- Cálculo de evaporação

A perda de óleo por evaporação é calculada baseada em uma abordagem analítica descrita por MACKAY *et al.* (1980).

Para a estimativa da taxa de transferência de massa por este processo, a formulação de MACKAY & MATSUGU (1973) é adotada:

$$\frac{dm}{dt} = (K_2 \cdot P_{vp} \cdot \frac{A}{R \cdot T}) \cdot f \cdot MW \quad \text{(Equação B.1)}$$

onde m = massa evaporada (g);

t = tempo (s);

K_2 = coeficiente de transferência de massa;

P_{vp} = pressão de vapor (atm);

A = área da mancha (m^2);

R = constante universal dos gases ($R = 8.206 \times 10^{-5} \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mol}\cdot\text{K}$);

T = temperatura do óleo (K);

f = fração da mancha composta por substâncias voláteis;

MW = peso molecular (g/mol) da porção volátil.

Sendo a variável K_2 parametrizada da seguinte forma:

$$K_2 = 0.029 \cdot W^{0.78} \cdot D^{-0.11} \cdot S_c^{-0.67} \cdot \sqrt{\frac{(MW + 29)}{MW}} \quad (\text{Equação B.2})$$

onde W = velocidade do vento (m/hr);

D = diâmetro da mancha de óleo (m);

Sc = número de Schmidt ($Sc = 2.7$, segundo MACKAY *et al.*, 1980).

- Cálculo de espalhamento

O espalhamento do óleo na superfície da água do mar é determinado pelo efeito combinado da energia potencial da massa de óleo, da viscosidade e de sua tensão superficial.

Trata-se de um processo importante principalmente nos primeiros estágios de transformação da mancha devido à influência da sua área superficial em outros processos, como a evaporação.

De acordo com a formulação de FAY (1971) e de HOULT (1972) modificada por MACKAY *et al.* (1980), a taxa de variação da área superficial da mancha de óleo com o tempo pode ser expressa como:

$$\frac{dA}{dt} = K_1 \cdot A^{1/3} \cdot \left(\frac{Vm}{A}\right)^{4/3} \quad (\text{Equação B.3})$$

onde A = área da mancha (m²);

t = tempo (s);

K_1 = taxa de espalhamento constante (s⁻¹),

$K_1 = 5 \times 10^8$ / dia, segundo AUDUNSON *et al.* (1984, *apud* REED, 1989);

V_m = volume de óleo derramado (m³).

- Cálculo de “Entranhamento”

O processo de “entrinhamento” de óleo na coluna d’água ocorre devido à troca de massa entre os dois fluidos diferentes, no caso a água do mar e o óleo, gerando uma mistura.

No modelo NICOIL, a fração de óleo presente na superfície do mar sujeita ao “entrinhamento” (E_a) por hora é calculada através da formulação de MACKAY *et al.* (1980, *apud* REED, 1989):

$$E_a = 0.11 \cdot (W + 1)^2 \quad \text{(Equação B.4)}$$

onde W = velocidade do vento (m/s).

Sendo a fração de óleo que não retorna à mancha expressa por:

$$E_b = (1 + 50 \cdot \mu^{1/2} \cdot d \cdot s_t)^{-1} \quad \text{(Equação B.5)}$$

onde μ = viscosidade do óleo (g/m·s);

d = espessura da mancha de óleo (m);

s_t = tensão na interface entre a água e o óleo.

Sendo o volume de óleo “entrinhado” em metros cúbicos por hora obtido através do produto $E_a \cdot E_b$.

A viscosidade do óleo varia de acordo com a formação de mousse (MACKAY *et al.*, 1980, *apud* REED, 1989) e é modelada da seguinte maneira:

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_0 \cdot e^{C_4 F_{evap}} \quad \text{(Equação B.6)}$$

onde μ_0 = viscosidade inicial do óleo (g/m·s);

C_4 = varia de 1 para gasolina a 10 para outros produtos de petróleo segundo MACKAY *et al.* (1982, *apud* REED, 1989);

F_{evap} = fração evaporada (volume evaporado/volume total derramado).

Apêndice C. *Princeton Ocean Model (POM)*

O campo de correntes utilizado no experimento realizado para analisar a eficiência do algoritmo adaptativo do modelo de transporte de óleo NICOIL desenvolvido no presente trabalho foi gerado a partir de uma simulação realizada pelo Laboratório de Modelagem de Processos Marinhos e Atmosféricos (LAMMA) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) a partir da aplicação do modelo hidrodinâmico *Princeton Ocean Model (POM)*, desenvolvido por BLUMBERG e MELLOR (1983), à bacia sudeste do Brasil.

O POM é um modelo numérico pseudo-tridimensional desenvolvido por BLUMBERG & MELLOR (1983), baseado nas equações hidrodinâmicas primitivas.

Este modelo utiliza o sistema de coordenadas sigma (PHILLIPS, 1957 *apud* TORRES JR, 1995), que objetiva incluir uma topografia do fundo mais realista quando da discretização das equações.

Trata-se de um modelo que pode ser aplicado tanto para estudos diagnósticos, como para estudos de previsões de correntes oceânicas e da estrutura termohalina.

As equações governantes do modelo são as equações de movimento, aproximação hidrostática, continuidade de volume, estado da água do mar e conservação de sais e calor.

Neste modelo, é aplicada a aproximação de Boussinesq, na qual despreza-se a variação de densidade na horizontal. As equações do movimento são separadas em modo externo ou barotrópico e modo interno ou baroclínico, permitindo que sejam utilizados intervalos de tempo (Δt) diferentes na integração do modelo para os modos externo e interno, devido às diferentes velocidades de propagação das ondas nestes dois modos (bem mais rápida no modo externo), o que propicia uma economia significativa de tempo de processamento.

Para aplicar o modelo de forma conveniente é necessário definir, para uma determinada área estudada, valores realísticos de profundidades e geometria, como também as condições de contorno e iniciais. As condições iniciais adotadas no modelo são obtidas a partir das informações de estratificação da coluna d'água (temperatura e salinidade da água do mar, principalmente), utilizadas para descrever

oceanograficamente a região e inicializar o modelo. As condições de contorno adotadas são a superfície, a costa e o fundo, mais as fronteiras abertas (se houver). A condição para a superfície é definida pela distribuição da tensão superficial do vento e para o fundo será definida pela distribuição da tensão de arrasto com o fundo.

Apêndice D. **Figuras referentes ao transporte em cada uma das sub-grades adaptadas no decorrer da simulação referente à modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa (Simulação III).**

Na Figura D.1 podem ser observadas as posições inicial e final (após o transporte) da mancha de óleo na Sub-grade 1.

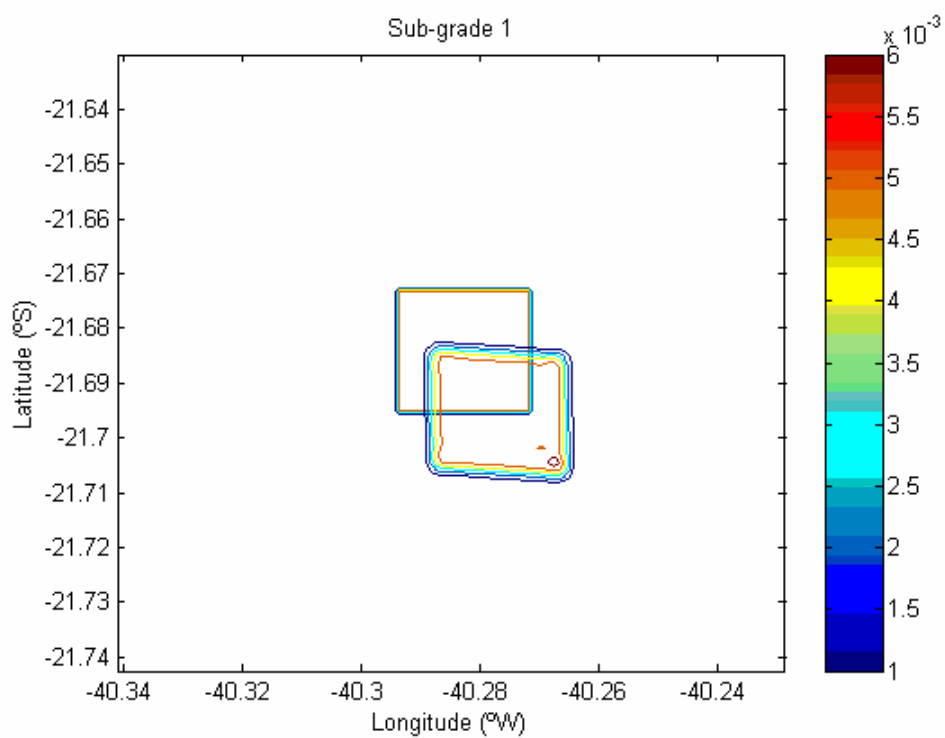


Figura D.1. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 1 – Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 2 está representada na Figura D.2, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

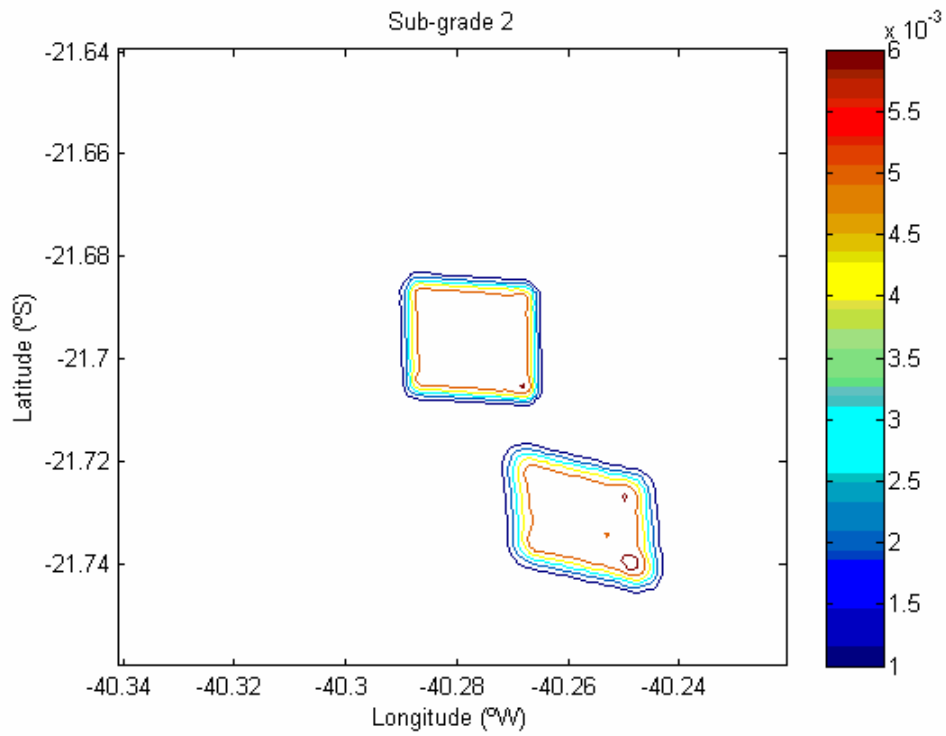


Figura D.2. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 2
– Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 3 está representada na Figura D.3, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

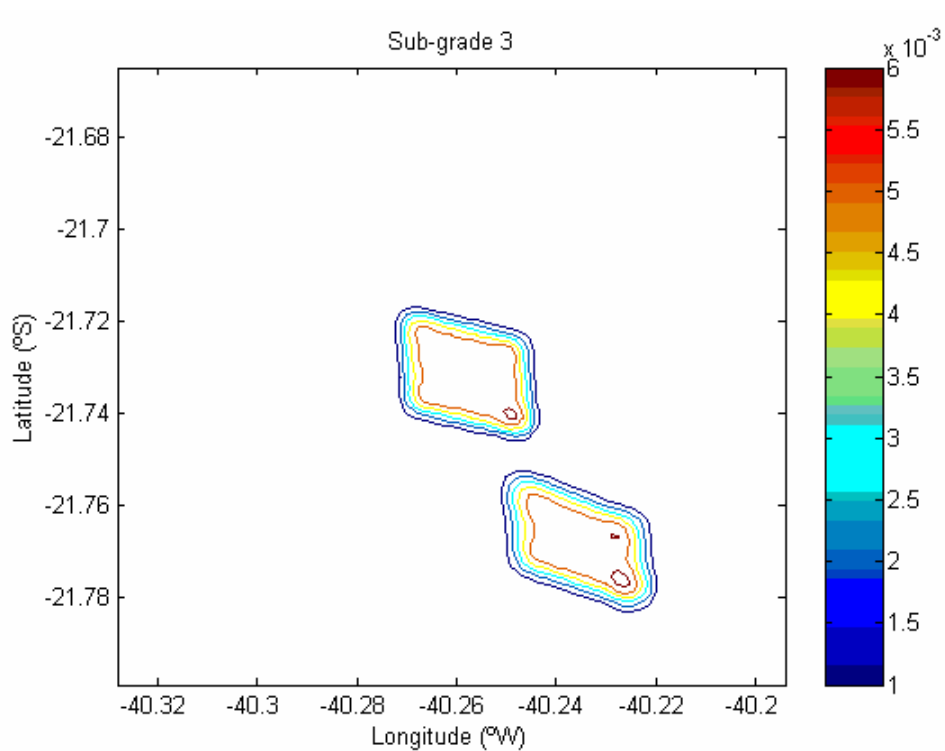


Figura D.3. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 3 – Espessura de óleo em metros.

As posições inicial e final da mancha de óleo para a Sub-grade 4 são observadas na Figura D.4.

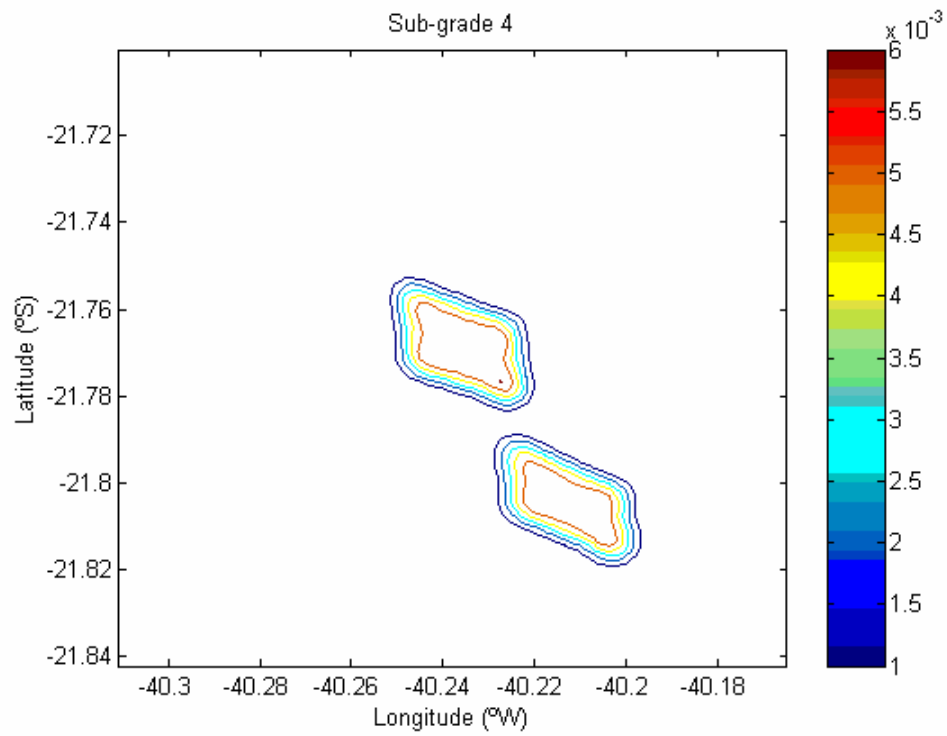


Figura D.4. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 4 – Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 5 está representada na Figura D.5, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

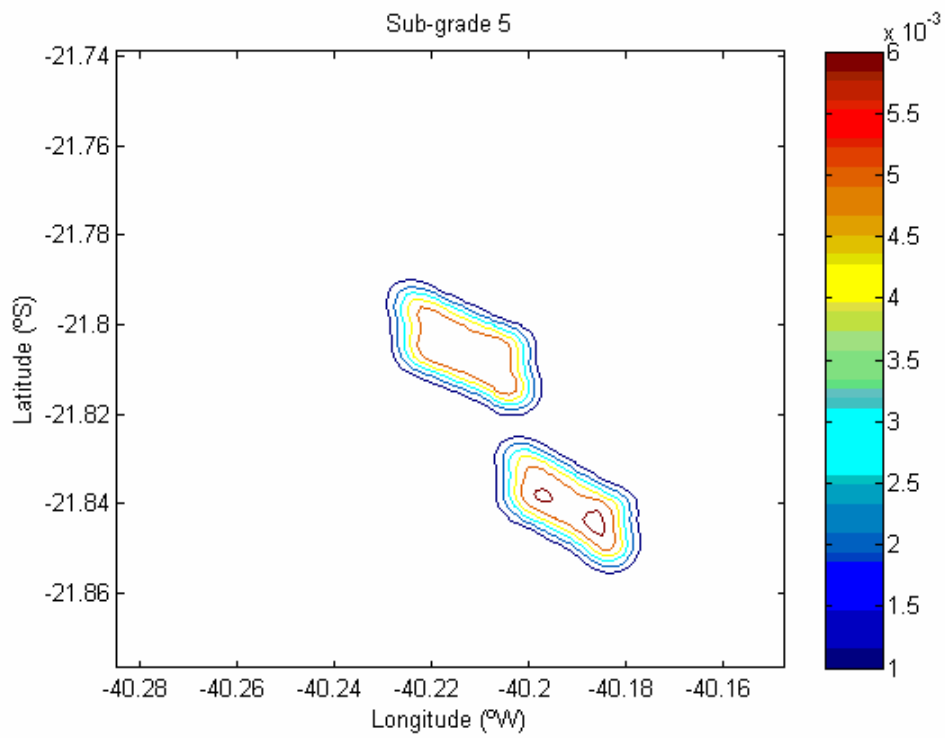


Figura D.5. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 5
– Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 6 está representada na Figura D.6, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

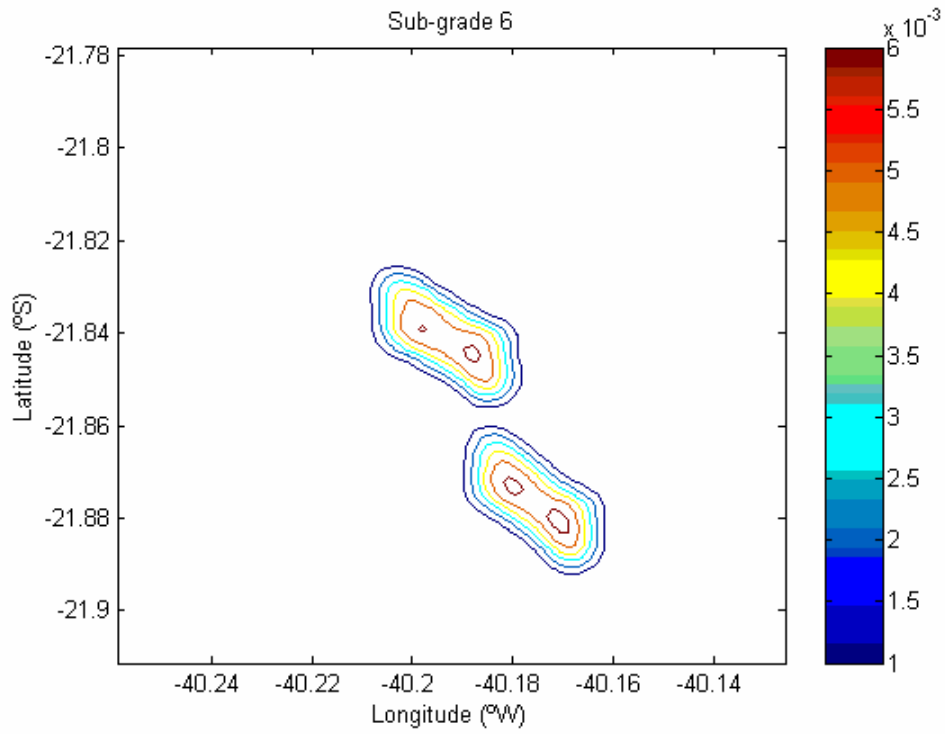


Figura D.6. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 6
– Espessura de óleo em metros.

As posições inicial e final da mancha de óleo para a Sub-grade 7 são observadas na Figura D.7.

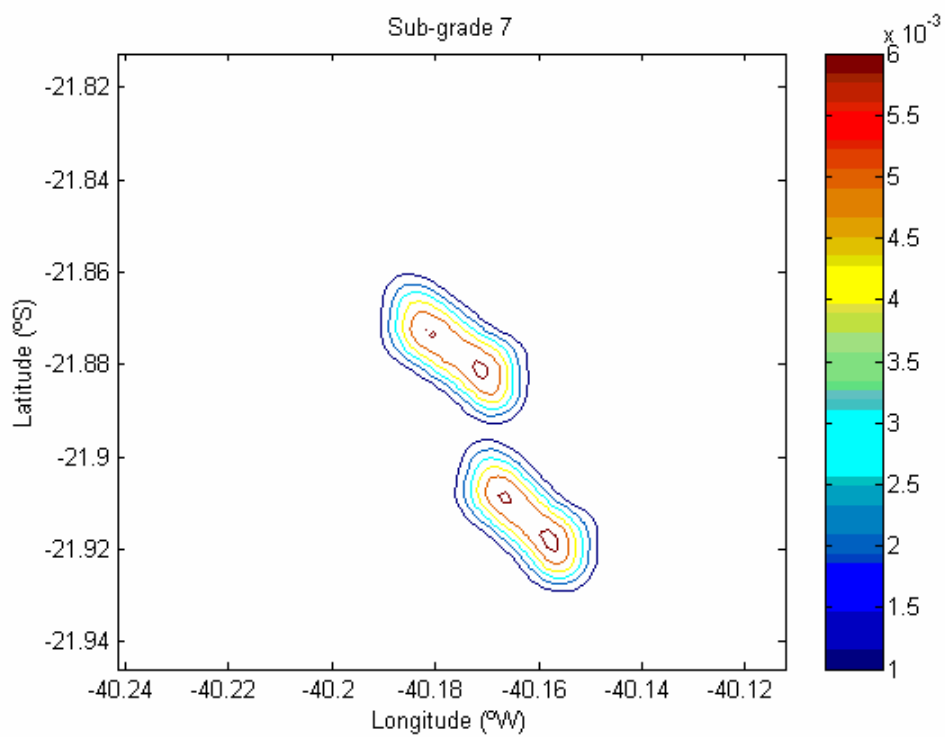


Figura D.7. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 7
– Espessura de óleo em metros.

As posições inicial e final da mancha de óleo para a Sub-grade 8 são observadas na Figura D.8.

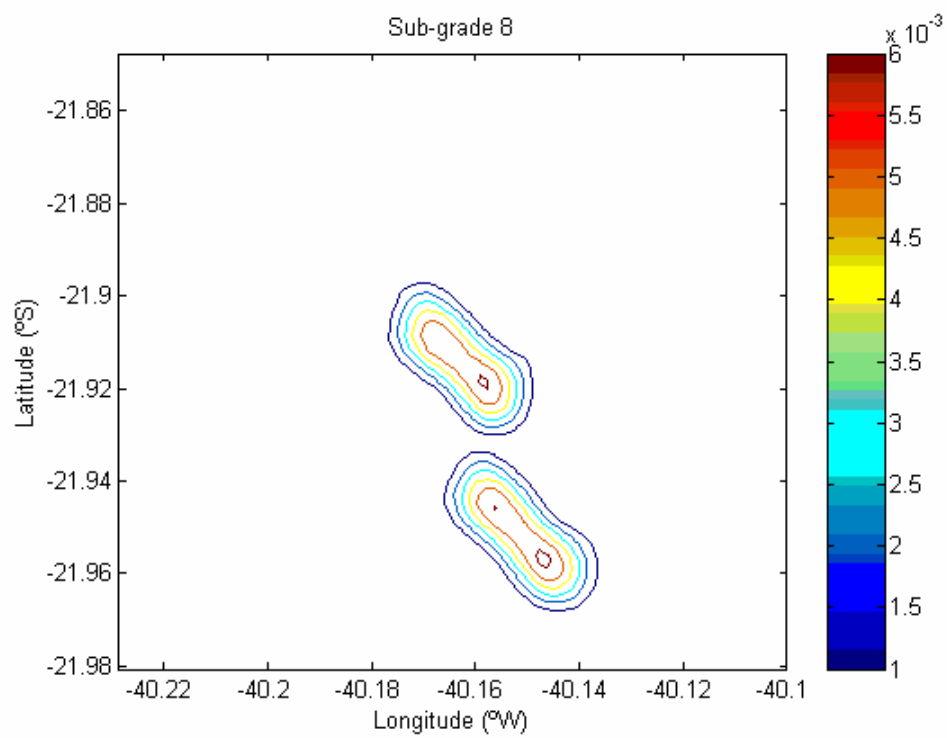


Figura D.8. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 8 – Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 9 está representada na Figura D.9, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

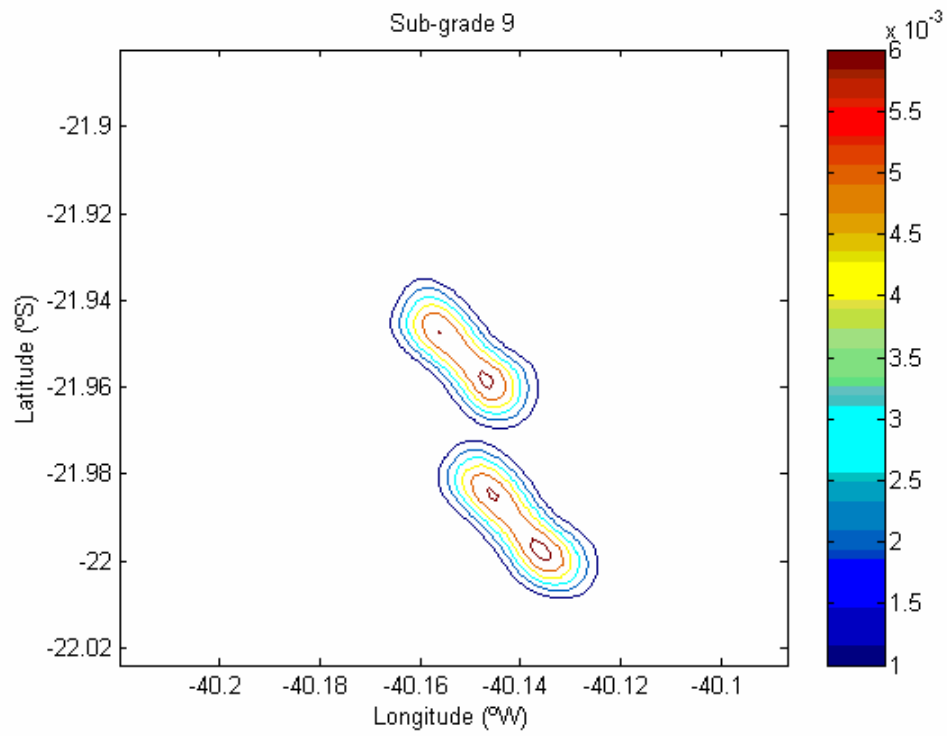


Figura D.9. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 9 – Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 10 está representada na Figura D.10, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

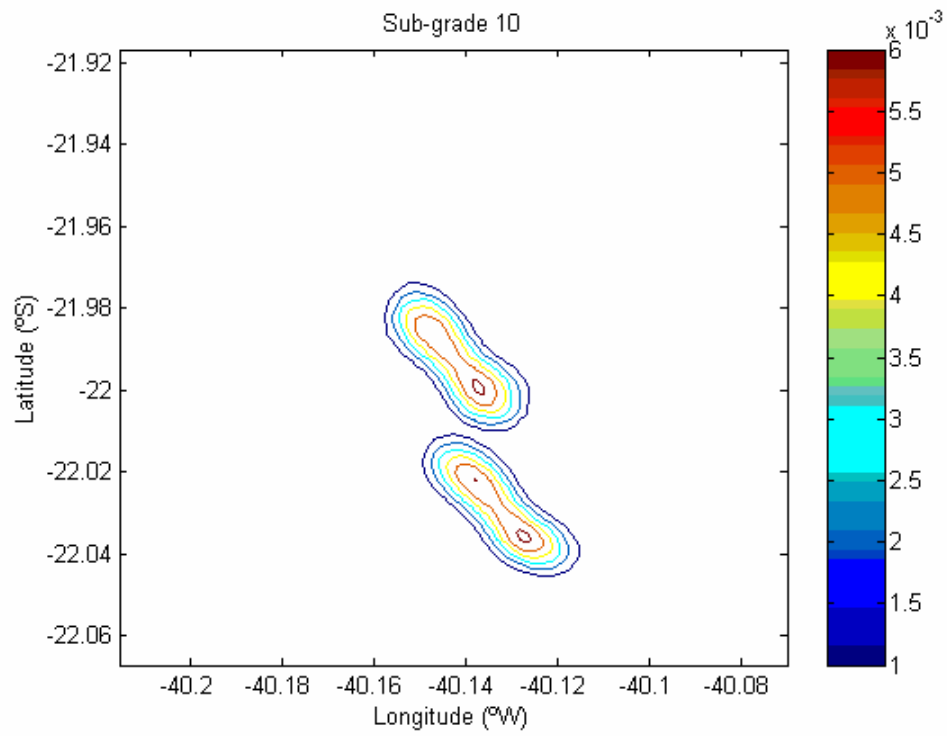


Figura D.10. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 10 – Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 11 está representada na Figura D.11, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

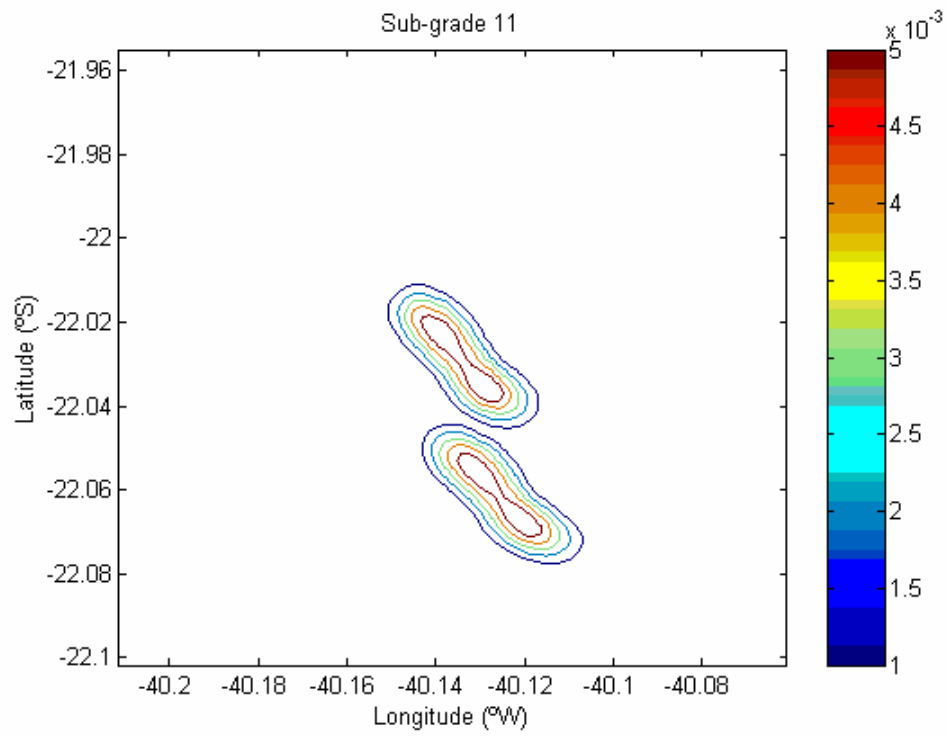


Figura D.11. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 11 – Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 12 está representada na Figura D.12, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

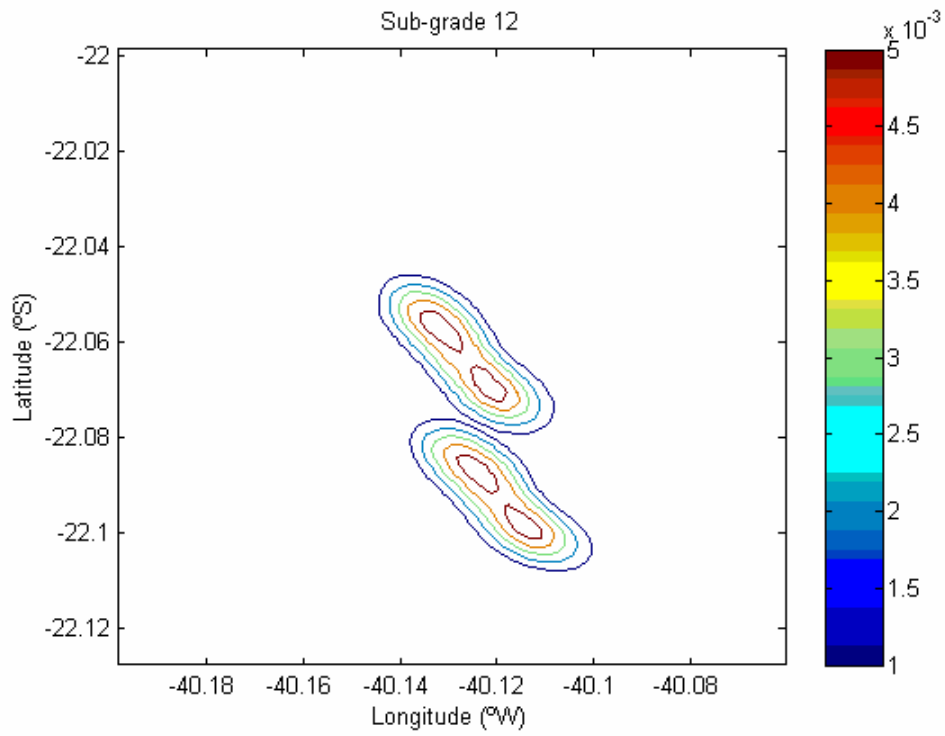


Figura D.12. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 12 – Espessura de óleo em metros.

A Sub-grade 13 está representada na Figura D.13, onde podem ser observadas as posições inicial e final da mancha de óleo.

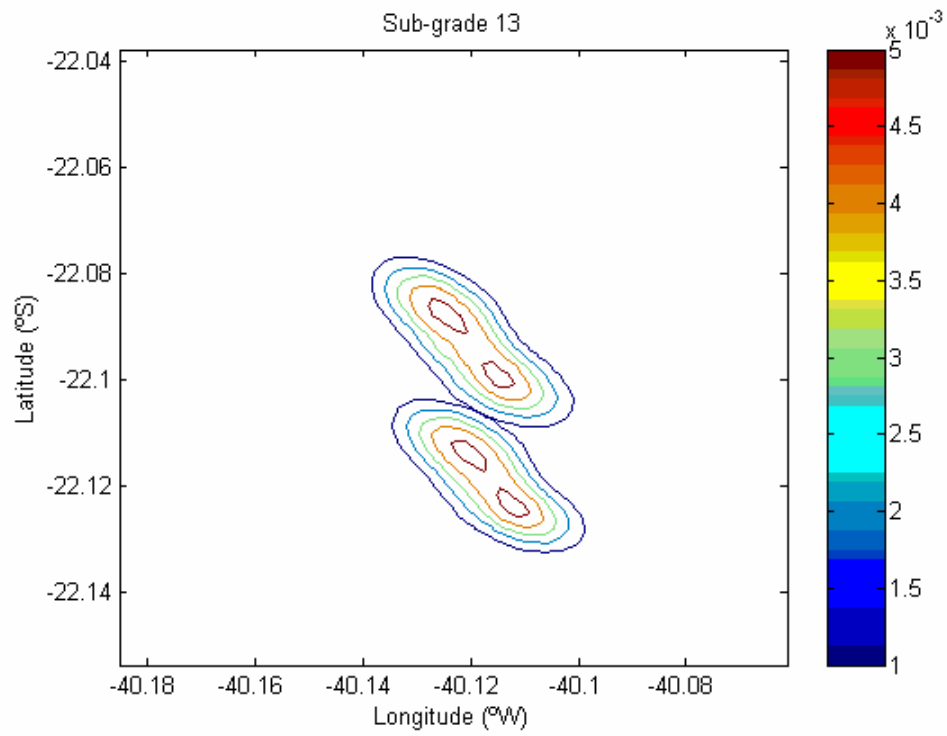


Figura D.13. Modelagem de transporte de óleo com grade adaptativa – Sub-grade 13 – Espessura de óleo em metros.