

**SISTEMA DE INFORMAÇÃO PARA A MODELAÇÃO MATEMÁTICA DE
DERRAMES DE HIDROCARBONETOS EM AMBIENTE MARINHO**

Rui Carlos Moreira Brás Gomes

Dissertação para a obtenção do Grau de Mestre em Tecnologia do Ambiente pela Escola
de Engenharia da Universidade do Minho

**UNIVERSIDADE DO MINHO
2004**

Dissertação realizada sob a orientação de:

Jose Luis da Silva Pinho

Professor Auxiliar

e co-orientação de:

José Manuel Pereira Vieira

Professor Catedrático

AGRADECIMENTOS

No decorrer deste trabalho, houve um conjunto de pessoas que se mostraram determinantes para a obtenção de um bom resultado final.

Gostaria de agradecer primeiramente ao Doutor José Luís da Silva Pinho, Professor auxiliar do departamento de Engenharia Civil da Universidade do Minho, cuja orientação e conhecimentos foram indispensáveis para a obtenção de um trabalho com qualidade.

Ao Doutor José Manuel Pereira Vieira, Professor Catedrático do departamento de Engenharia Civil da Universidade do Minho, pela co-orientação da dissertação e pela enorme experiência transmitida.

Ao Doutor José Simão Antunes do Carmo, Professor Associado do departamento de Engenharia Civil da Universidade de Coimbra, por todo o material recolhido relativo ao acidente do N/T Prestige e por toda a documentação fornecida que foi de elevada importância para a realização do trabalho.

À Doutora Regina Nogueira, professora auxiliar do departamento de Engenharia Biológica da Universidade do Minho, à Doutora Ana Cristina Rodrigues, investigadora do departamento de Engenharia Biológica Universidade do Minho, e ao Doutor António Guerreiro Brito, professor auxiliar do departamento de Engenharia Biológica da Universidade do Minho, pelo apoio no desenvolvimento do modelo de biodegradação de Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos.

A todos os meus colegas de mestrado que proporcionaram um excelente ambiente de camaradagem e de amizade, aos meus amigos mais próximos que souberam abdicar por muitas vezes da minha companhia, ao meu sócio e amigo Nuno Ramos pelo apoio e suporte e a Susana pelo especial carinho e atenção.

Uma especial atenção para toda a minha família, pelo apoio que me permitiu a realização deste trabalho. Obrigado!

RESUMO

O Trabalho realizado teve como objectivo a construção de um sistema de informação para a modelação matemática de derrames de hidrocarbonetos em ambiente marinho (SIMDHAM). Com este sistema pretende-se criar uma ferramenta de gestão e apoio à decisão em situações de acidentes com produtos petrolíferos derramados em águas costeiras.

Desta forma, foram identificados os principais fenómenos responsáveis pelo transporte e degradação de produtos petrolíferos no mar, nomeadamente de hidrodinâmica marinha, de transporte, de dispersão e de degradação dos hidrocarbonetos derramados.

O sistema criado é constituído por três componentes: bases de dados, modelos matemáticos e sistema de informação geográfica. As bases de dados são referentes a informações geoinformáticas, aspectos ambientais, acidentes e produtos petrolíferos derramados. Esta informação foi processada de forma a ser utilizada nos modelos matemáticos utilizados.

Foram integrados no SIMDHAM os seguintes modelos: hidrodinâmicos (RMA2 e POM); transporte (RMA4, eulariano e GNOME, lagrangeano); de degradação química (ADIOS2 e OILDEGRAD) e biológica (BIODEGRAD). Os modelos OILDEGRAD e BIODEGRAD resultam da implementação em código FORTRAN das equações descritivas destes processos, desenvolvida no âmbito deste trabalho.

Foram comparados os dois modelos de transporte e identificadas as suas principais potencialidades e limitações relativamente a situações de derrames petrolíferos. Os modelos OILDEGRAD e BIODEGRAD foram implementados e testados com base em trabalhos anteriormente realizados, demonstrando um bom desempenho.

O SIMDHAM foi testado para o caso do derrame do N/T Prestige, que ocorreu ao largo da costa Noroeste da Península Ibérica em Novembro de 2002.

ABSTRACT

The objective of the current work was the construction of an information system for the mathematical modeling of oil spills in marine environment (SIMDHAM). This system will serve as a decision support tool for the management of oil spill events in coastal waters.

The most important phenomena responsible for the transportation and degradation of oil products in the sea, were identified, namely marine hydrodynamics, transportation, dispersion and degradation of spilled hydrocarbons.

The system has three components: data base, mathematical models, and a Geographic Information System. The data base refers to geoinformatics information, environmental and accidents data, and oil spills products. This information is processed in a way that can be applied in the mathematical models.

A set of models was implemented: hydrodynamics (RMA2 and POM); transport (eulerian RMA4 and lagrangian GNOME); chemical degradation (ADIOS2 and OILDEGRAD) and biological degradation (BIODEGRAD).

There were used two hydrodynamic models, two transportation models and three degradation models. The models OILDEGRAD e BIODEGRAD were implemented in FORTRAN codes for the resolution of the equations describing these processes.

A comparison of the two transport models was made being identified their main potentialities and limitations, regarding the oil spills events. The models OILDEGRAD e BIODEGRAD were implemented and tested based on previously works, and a good performance was registered.

The SIMDHAM was applied to the N/T Prestige oil spill case occurred in the North-western coast of the Iberic Peninsula, in November of 2002.

ÍNDICE

| | |
|--|----------|
| 1. INTRODUÇÃO..... | 1 |
| 1.1. Derrames petrolíferos e modelação matemática..... | 1 |
| 1.2. Objectivos do trabalho desenvolvido..... | 2 |
| 1.3. Metodologia utilizada | 3 |
| 2. PROCESSOS DE TRANSPORTE E DEGRADAÇÃO DE HIDROCARBONETOS DERRAMADOS NO MEIO MARINHO | 7 |
| 2.1. Hidrodinâmica marinha | 7 |
| 2.1.1. Acções responsáveis pela hidrodinâmica marinha | 7 |
| 2.1.1.1. Correntes induzidas pelo vento e ondulação..... | 8 |
| 2.1.1.2. Correntes termohalinas e estratificação da coluna de água | 8 |
| 2.1.1.3. Correntes induzidas pela maré..... | 9 |
| 2.1.1.4. Aceleração de <i>Coriolis</i> | 10 |
| 2.1.2. Equações de Movimento..... | 10 |
| 2.2. Transporte de massa..... | 12 |
| 2.2.1. Transporte dispersivo e transporte advectivo | 12 |
| 2.2.1.1. Transporte dispersivo..... | 13 |
| 2.2.1.2. Transporte advectivo..... | 14 |
| 2.2.2. Modelos de Transporte | 14 |

| | |
|---|-----------|
| 2.2.2.1. Modelos Eulerianos..... | 14 |
| 2.2.2.2. Modelos Lagrangeanos | 15 |
| 2.3. Comportamento e características dos hidrocarbonetos em ambiente marinho | 16 |
| 2.3.1. Propriedades físicas e composição química dos hidrocarbonetos..... | 16 |
| 2.3.1.1. Propriedades Físicas..... | 16 |
| 2.3.1.2. Composição Química..... | 18 |
| 2.3.2. Envelhecimento..... | 20 |
| 2.3.2.1. Degradação física e química | 20 |
| 2.3.2.2. Biodegradação..... | 22 |
| 2.3.3. Toxicidade..... | 24 |
| 3. SISTEMA DE INFORMAÇÃO DESENVOLVIDO (SIMDHAM)..... | 27 |
| 3.1. Bases de dados | 27 |
| 3.1.1. Dados Geográficos | 29 |
| 3.1.1.1. ETOPO2..... | 29 |
| 3.1.1.2. GSHHS..... | 29 |
| 3.1.2. Dados Ambientais | 31 |
| 3.1.2.1. ARGO..... | 31 |
| 3.1.2.2. World Ocean Atlas..... | 34 |

| | |
|--|----|
| 3.1.2.3. QuickScat..... | 36 |
| 3.1.2.4. SR95..... | 36 |
| 3.1.2.5. TOPEX/Poseidon e Jason-1 | 37 |
| 3.1.3. Dados dos derrames | 38 |
| 3.1.3.1. Informações dos acidentes | 38 |
| 3.1.3.2. Dados dos produtos derramados | 39 |
| 3.2. Ferramentas de modelação..... | 40 |
| 3.2.1. Modelos Hidrodinâmicos..... | 40 |
| 3.2.1.1. RMA2 | 40 |
| 3.2.1.2. POM..... | 41 |
| 3.2.2. Modelos de Transporte | 41 |
| 3.2.2.1. RMA4 | 41 |
| 3.2.2.2. GNOME..... | 42 |
| 3.2.3. Modelos de Degradação..... | 43 |
| 3.2.3.1. ADIOS2 | 43 |
| 3.2.3.2. OIOLDEGRAD e BIODERAD | 43 |
| 3.3. Sistema de Informação Geográfica..... | 44 |
| 3.4. Processamento de dados | 44 |

| | |
|--|-----------|
| 3.4.1. Ferramenta de pré e pós processamento de dados (SMS)..... | 44 |
| 3.4.2. Ferramenta de processamento do LHRH | 45 |
| 3.4.3. Ferramentas de leitura de ficheiros NetCDF e HDF | 47 |
| 3.5. Fluxo de informação interna | 49 |
| 3.5.1. Fluxo de informação para das bases de dados..... | 49 |
| 3.5.2. Fluxo de informação nos modelos matemáticos | 51 |
| 3.5.3. Fluxo de informação para o SIG e para o utilizador final..... | 52 |
| 4. ASPECTOS PARTICULARES DE COMPONENTES DO SIMDHAM..... | 55 |
| 4.1. Avaliação do desempenho dos modelos de transporte..... | 55 |
| 4.1.1. Avaliação do desempenho do modelo Euleriano | 56 |
| 4.1.1.1. Problemas de estabilidade e erro numérico associado | 56 |
| 4.1.1.2. Definição do volume dos elementos e concentração no meio | 58 |
| 4.1.1.3. Simulações efectuadas..... | 60 |
| 4.1.2. Avaliação do desempenho do modelo Lagrangeano..... | 69 |
| 4.2. Base de dados de características de produtos petrolíferos e de acidentes..... | 74 |
| 4.2.1. Características de produtos petrolíferos | 74 |
| 4.2.2. Base de dados de acidentes | 74 |
| 4.3. Implementação e análise dos modelos de degradação | 75 |

| | |
|--|-----------|
| 4.3.1. Implementação e análise do modelo de degradação físico-química..... | 75 |
| 4.3.2. Implementação e análise do modelo de degradação biológica..... | 77 |
| 5. CASO DE ESTUDO – DERRAME DO N/T <i>PRESTIGE</i> | 81 |
| 5.1. Bases de dados do Acidente..... | 82 |
| 5.1.1. Histórico do Acidente | 82 |
| 5.1.2. Material derramado..... | 87 |
| 5.1.3. Dados de geográficos..... | 87 |
| 5.1.4. Dados Ambientais..... | 89 |
| 5.2. Modelação do Transporte | 90 |
| 5.2.1. Modelo Lagrangeano – GNOME | 91 |
| 5.2.1.1. Criação do modelo lagrangeano | 91 |
| 5.2.1.2. Cenários simulados | 92 |
| 5.2.1.3. Análise de resultados | 93 |
| 5.2.2. Modelo Euleriano – RMA4 | 94 |
| 5.2.2.1. Criação do modelo euleriano | 94 |
| 5.2.2.2. Análise de resultados | 96 |
| 5.2.3. Comparação dos resultados – GNOME e RMA4..... | 98 |
| 5.3. Modelação dos processos de degradação..... | 100 |

| | |
|--|------------|
| 5.3.1. Degradação físico-química..... | 100 |
| 5.3.2. Degradação biológica..... | 104 |
| 6. CONCLUSÕES E DESENVOLVIMENTOS FUTUROS..... | 107 |
| 6.1. Conclusões | 107 |
| 6.2. Desenvolvimentos Futuros..... | 109 |
| 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 111 |
| ANEXO A – BASES DE DADOS | 117 |
| A.1. DADOS GEOGRÁFICOS | 118 |
| A.2. DADOS AMBIENTAIS | 119 |
| A.3. DADOS DOS DERRAMES | 122 |
| ANEXO B - CARACTERÍSTICAS FÍSICO-QUÍMICAS DO FUEL OIL DERRAMADO PELO N/T PRESTIGE | 125 |

Índice de Figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1.1 – Componentes de um sistema de informação. | 2 |
| Figura 2.1 - Principais acções responsáveis pelas correntes oceânicas. | 8 |
| Figura 2.2 - Deformação da superfície terrestre provocada pela Lua..... | 9 |
| Figura 2.3 - Efeito da aceleração de <i>Coriolis</i> sobre as correntes marinhas | 10 |
| Figura 2.4 - Transporte de massa: a) dispersão e b) advecção. | 12 |
| Figura 2.5 - Valores dos coeficientes de dispersão em meio hídrico e meio sedimentar (adaptado de Chapra, 1997) | 14 |
| Figura 2.6 -Perspectiva do observador em relação a um sistema Euleriano..... | 15 |
| Figura 2.7 - Perspectiva do observador em relação a um sistema Lagrangeano. | 15 |
| Figura 2.8 -Exemplos de estruturas de alguns Compostos Aromáticos | 19 |
| Figura 2.9 - Principais fenómenos de envelhecimento associados a derrames de produtos petrolíferos no mar | 20 |
| Figura 3.1 - Organização dos componentes do sistema de informação..... | 28 |
| Figura 3.2- Dados de altimetria e batimetria da ETOPO2 (adaptado de NOAA (2003b)) | 30 |
| Figura 3.3 - Dados de linhas de costa de alta resolução da base de dados GSHHS para a Península Ibérica..... | 30 |
| Figura 3.4 - Funcionamento das bóias (adaptado de http://Argo.jcommops.org) | 32 |
| Figura 3.5 - Visualização de trajectórias e perfis registados on-line (extraído de http://Argo.jcommops.org) | 33 |
| Figura 3.6 - Visualização de perfis registados on-line (extraído de http://Argo.jcommops.org) | 33 |
| Figura 3.7 – Trajectória das boias e perfis de temperatura e salinidade registados pelo utilizador | 34 |
| Figura 3.8 - Dados de temperatura, salinidade e massa volúmica potencial da base de dados Levitus 94 | 35 |

| | |
|--|----|
| Figura 3.9 - Dados de temperatura, salinidade e oxigénio dissolvido da base de dados WOA01 (extraído de NOAA (2003a))..... | 35 |
| Figura 3.10 - Dados de intensidade do vento registados a 3 de Novembro de 2002 pelo QuickScat | 36 |
| Figura 3.11 - Medição da altura de onda na superfície oceânica (extraído de JPL, 2004a) | 38 |
| Figura 3.12 - Surface Water Modeling System – malha de elementos e resultados de uma simulação..... | 45 |
| Figura 3.13 - Selecção de batimetria e linhas de costa na ferramenta de processamento | 46 |
| Figura 3.14 - Geração de malhas de elementos finitos triangulares..... | 46 |
| Figura 3.15 - Variação da altura de maré | 47 |
| Figura 3.16 - ncBrowse para leitura de ficheiros NetCDF..... | 48 |
| Figura 3.17 - HDFview para leitura de ficheiros HDF | 48 |
| Figura 3.18 - Fluxograma geral de informação no SIMDHAM | 50 |
| Figura 3.19 - Fluxo de bases de dados | 51 |
| Figura 3.20 - Fluxo de dados para os modelos matemáticos | 52 |
| Figura 3.21 - Fluxo de dados no SIG e utilizador final..... | 53 |
| Figura 4.1 – Estabelecimento da profundidade dos elementos finitos..... | 59 |
| Figura 4.2 – Domínio considerado e malha de elementos finitos | 61 |
| Figura 4.3 – Resultado da Simulação 1 (concentração em mg l^{-1})..... | 61 |
| Figura 4.4 – Resultado da Simulação 2 (concentração em mg l^{-1})..... | 62 |
| Figura 4.5 - Resultado da Simulação 3 (concentração em mg l^{-1}) | 62 |
| Figura 4.6 – Domínio considerado e malha refinada de elementos finitos | 63 |
| Figura 4.7 – Resultado da Simulação 4 (concentração em mg l^{-1})..... | 64 |

| | |
|--|----|
| Figura 4.8 – Resultado da Simulação 5 (concentração em mg l^{-1}) | 64 |
| Figura 4.9 – Resultado da Simulação 6 (concentração em mg l^{-1}) | 65 |
| Figura 4.10 – Resultado da Simulação 7 (concentração em mg l^{-1}) | 65 |
| Figura 4.11 - Domínio alargado e respectiva malha de elementos finitos..... | 66 |
| Figura 4.12 – Resultado da Simulação 8 (concentração em mg l^{-1}) | 67 |
| Figura 4.13 – Resultado da Simulação 9 (concentração em mg l^{-1}) | 67 |
| Figura 4.14 – Resultado da Simulação 10 (concentração em mg l^{-1}) | 67 |
| Figura 4.15 – Resultado da Simulação 11 (concentração em mg l^{-1}) | 68 |
| Figura 4.16 – Resultado da Simulação 12 (concentração em mg l^{-1}) | 68 |
| Figura 4.17 – Resultado da Simulação 13 | 70 |
| Figura 4.18 – Resultado da Simulação 14 | 70 |
| Figura 4.19 – Resultado da Simulação 15 | 71 |
| Figura 4.20 – Resultado da Simulação 16 | 71 |
| Figura 4.21 – Resultado da Simulação 17 | 71 |
| Figura 4.22 – Resultado da Simulação 18 | 72 |
| Figura 4.23 – Resultado da Simulação 19 | 73 |
| Figura 4.24 – Resultado da Simulação 20 | 73 |
| Figura 4.25 – Formulário de registo de características de produtos petrolíferos..... | 74 |
| Figura 4.26 – Formulário de registo de dados do acidente | 75 |
| Figura 4.27 – Simulação da evolução do volume, área e espessura da mancha utilizando o modelo OILDEGRAD | 76 |
| Figura 4.28 – Simulação da evolução da evaporação, emulsificação e perda por dispersão utilizando o modelo OILDEGRAD. | 76 |

| | |
|--|----|
| Figura 4.29 – Simulação da evolução da viscosidade e densidade utilizando o modelo OILDEGRAD..... | 77 |
| Figura 4.30 - Resultados de biodegradação do modelo Biodegrad..... | 78 |
| Figura 4.31 – Resultados de biodegradação do fluoreno do modelo Biodegrad..... | 79 |
| Figura 5.1 - Ambiente geoinformático ArcView | 81 |
| Figura 5.2 - Localização da mancha observada em 14 de Novembro de 2002..... | 83 |
| Figura 5.3 - Manchas de petróleo na costa espanhola (CEDRE, 2003)..... | 84 |
| Figura 5.4 - Imagem de satélite do derrame no dia 17 de Novembro de 2002 (CEDRE, 2003)..... | 84 |
| Figura 5.5 - Afundamento do N/T Prestige (CEDRE, 2003)..... | 85 |
| Figura 5.6 – Posições do petroleiro Prestige | 86 |
| Figura 5.7 - Localização da mancha observada e respectivos dias | 86 |
| Figura 5.8 - Dados do ETOPO2 para o caso do N/T Presige..... | 88 |
| Figura 5.9 - Dados do GSHHS para o caso do N/T Presige..... | 88 |
| Figura 5.10 - Média mensal da temperatura (°C) de Novembro da base de dados Levitus94 para o caso do N/T Prestige..... | 89 |
| Figura 5.11 - Velocidades das componentes de vento do Quikscat para o caso do N/T Presige | 90 |
| Figura 5.12 - Resultados do SR95 para o caso do N/T Presige | 90 |
| Figura 5.13 - Simulação do derrame do N/T Prestige com o programa GNOME..... | 93 |
| Figura 5.14 - Comparação da simulação do derrame com imagens de satélite para o dia 17 de Novembro | 94 |
| Figura 5.15 - Malha de elementos finitos utilizada na simulação do derrame do N/T Prestige..... | 95 |
| Figura 5.16 - Elementos seleccionados para a definição da concentração inicial..... | 96 |

| | |
|---|-----|
| Figura 5.17 - Simulação do derrame do N/T Prestige com o programa RMA4..... | 97 |
| Figura 5.18 - Curvas de concentração do programa RMA4..... | 97 |
| Figura 5.19 - Simulação do GNOME visualizado no ArcView..... | 98 |
| Figura 5.20 - Simulação do RMA4 visualizado no ArcView..... | 99 |
| Figura 5.21 - Comparação das simulações dos dois modelos de transporte com os dados observados..... | 100 |
| Figura 5.22 - Resultados do ADIOS2 para a degradação do fuel oil nº 6..... | 101 |
| Figura 5.23 - Resultados do ADIOS2 para a densidade e viscosidade do fuel oil nº 6 | 101 |
| Figura 5.24 - Resultados do ADIOS2 para a emulsificação, evaporação e dispersão vertical do óleo..... | 102 |
| Figura 5.25 - Resultados do OilDegrad para a evolução do volume, área e espessura da mancha..... | 103 |
| Figura 5.26 - Resultados do OilDegrad para a evolução viscosidade e densidade..... | 103 |
| Figura 5.27 - Resultados do OilDegrad para a fracção evaporada, emulsificação e perdas por dispersão..... | 104 |
| Figura 5.28 - Resultados do modelo BIODEGRAD para o Naftaleno..... | 105 |
| Figura 5.29 - Resultados do modelo BIODEGRAD para o Naftaleno biodisponível e em fase sólida..... | 106 |

Índice de Quadros

| | |
|---|-----|
| Quadro 2.1 - Principais classes de hidrocarbonetos encontrados nos óleos (adaptado de Fingas, (2001))..... | 19 |
| Quadro 2.2 - Efeitos do Petróleo ou de HAP's individuais em diversos organismos (adaptado de Hoffman et al, 2003) | 25 |
| Quadro 3.1 - Características compiladas por Bobra e Callagham (1990) | 39 |
| Quadro 4.1 – Dados utilizados e características das simulações realizadas | 56 |
| Quadro 4.2 – Dados de um derrame para simulação do modelo OILDEGRAD (adaptado de Pinho et al, 2002). | 76 |
| Quadro 4.3 – Parâmetros cinéticos e condições iniciais da simulação da biodegradação de um hidrocarboneto | 78 |
| Quadro 5.1 - Principais constituintes químicos do produto derramado pelo Prestige.... | 87 |
| Quadro 5.2 - Intensidade e direcção média do vento durante a ocorrência do acidente do N/T Prestige para a zona do acidente..... | 92 |
| Quadro 5.3 - Valores dos vectores de vento e de deslocação u e v | 95 |
| Quadro 5.4 - Dados do fuel oil n.º6 da base de dados interna do ADIOS2 | 101 |
| Quadro 5.5 - Parâmetros utilizados no modelo OILDEGRAD | 102 |
| Quadro 5.6 - Parâmetros utilizados no modelo BIODERAD | 105 |
| Quadro B.1 – Principais características do Fuel oil n.º6..... | 126 |
| Quadro B.2 – Repartição das grandes classes de produtos por espectroscopia de massa de alta resolução..... | 126 |
| Quadro B.3 – Repartição por famílias químicas por espectrometria de massa de alta resolução das fracções saturadas+aromáticas | 127 |
| Quadro B.4 – Determinação dos BTEX (Hidrocarbonetos Aromáticos) e dos derivados do naftaleno contidos no fuel oil do Prestige..... | 128 |
| Quadro B.5 - Concentração em hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (HAP) presentes na água do mar após um contacto de 5 dias com o fuel de referência do Prestige e do produto emulsionado..... | 128 |

| | |
|---|-----|
| Quadro B.6 – Concentração em hidrocarbonetos voláteis presentes na água do mar após um contacto de 5 dias com o fuel de referência do Prestige e do produto emulsionado | 129 |
|---|-----|

Simbologia

| | |
|-----------|---|
| a | Aceleração (ms^{-2}) |
| A | Área do derrame (m^2) |
| A_o | Área da mancha (m^2) |
| A_e | Área do elemento (m^2) |
| A_{sw} | Área de contacto líquido/sólido (m^2) |
| B | Quantidade de microorganismos ($mg\ m^{-3}$) |
| C | Concentração do constituinte ($kg\ m^{-3}$) |
| C | Concentração de substrato biodisponível ($mg\ m^{-3}$) |
| C_{max} | Concentração máxima de substrato no meio ($mg\ m^{-3}$) |
| C_r | Concentração de substrato não disponível para a degradação biológica ($mg\ m^{-3}$) |
| C_μ | Taxa de recuperação mecânica do produto ao longo do tempo |
| D | Coefficiente de difusão molecular ($m^2\ s^{-1}$) |
| dC/dx | Gradiente de concentração ($kg\ m^{-3}\ s^{-1}$) |
| dF_e/dt | Taxa de evaporação |
| dY/dt | Taxa de emulsificação |
| E | Coefficiente de dispersão ($m^2\ s^{-1}$) |
| E_x | Coefficiente de dispersão para direcção x ($m^2\ s^{-1}$) |
| E_y | Coefficiente de dispersão para direcção y ($m^2\ s^{-1}$) |
| E_z | Coefficiente de dispersão para direcção z ($m^2\ s^{-1}$) |
| F | Força ($kg\ ms^{-2}$) |
| F_e | Fracção de perdas por evaporação |
| F_x | Componente da força de volume no eixo dos xx por unidade de massa ($N\ kg^{-1}$) |
| F_y | Componente da força de volume no eixo dos yy por unidade de massa ($N\ kg^{-1}$) |
| F_z | Componente da força de volume no eixo dos zz por unidade de massa ($N\ kg^{-1}$) |
| h_o | Espessura da mancha de produto derramado (cm) |
| J_x | Fluxo de massa na direcção de x ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$) |
| K | Constante de transferência de massa do substrato para a célula ($m^3\ s^{-1}$) |
| K_l | Constante relativa ao aumento da área |
| k_d | Taxa de dissolução do substrato em meio aquoso ($m\ s^{-1}$) |

| | |
|-----------|---|
| K_p | Coeficiente de transferência de massa (ms^{-1}) |
| k_r | Constante de transferência de massa para a fase biodisponível ($mg\ m^{-3}$) |
| K_s | Concentração de semi-saturação ($mg\ m^{-3}$) |
| M | Massa (kg) |
| m_o | Massa do produto petrolífero (kg) |
| m_i | Massa do componente i (kg) |
| M_i | Massa molar desse constituinte ($g\ mol^{-1}$) |
| N_x | Fluxo de matéria que é transportada por advecção na direcção x , ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$) |
| P | Pressão (Pa) |
| \hat{P} | Média temporal da pressão (Pa) |
| P_i | Pressão de vapor desse constituinte (atm) |
| R | Constante dos gases perfeitos |
| S_i | Termo representativo das fontes e sumidouros do constituinte |
| T | Temperatura absoluta ($^{\circ}K$) |
| T | Temperatura do produto ($^{\circ}K$) |
| T_0 | Temperatura inicial ($^{\circ}K$) |
| T_G | Gradiente da curva de destilação ($^{\circ}K$) |
| u | Valor instantâneo da componente de velocidade no eixo dos xx (ms^{-1}) |
| \hat{u} | Média temporal da componente de velocidade u ($m\ s^{-1}$) |
| u' | Flutuações da componente da velocidade u ($m\ s^{-1}$) |
| U_v | Velocidade do vento (ms^{-1}) |
| U_x | Componente de velocidade do meio na direcção x ($m\ s^{-1}$) |
| U_y | Componente de velocidade do meio na direcção y ($m\ s^{-1}$) |
| U_z | Componente de velocidade do meio na direcção z ($m\ s^{-1}$) |
| v | Valor instantâneo da componente de velocidade no eixo dos yy (ms^{-1}) |
| V_{o0} | Volume inicial de hidrocarboneto derramado no mar (m^3) |
| \hat{v} | Média temporal da componente de velocidade v ($m\ s^{-1}$) |
| v' | Flutuações da componente da velocidade v ($m\ s^{-1}$) |
| V_e | Volume do elemento (m^3) |
| V_o | Volume da mancha (m^3) |

| | |
|---------------|--|
| V_o | Volume de produto petrolífero (m^3) |
| v_x | Velocidade do meio na direcção x ($m s^{-1}$) |
| W | Valor instantâneo da componente de velocidade no eixo dos zz (ms^{-1}) |
| \hat{w} | Média temporal da componente de velocidade w ($m s^{-1}$) |
| w' | Flutuações da componente da velocidade w ($m s^{-1}$) |
| X_i | Fracção molar do constituinte i |
| Y | Coefficiente de rendimento da biomassa |
| Y | Fracção emulsificada |
| Y_d | Taxa de perdas por dispersão vertical |
| Y^F | Fracção de água final do processo de emulsificação |
| γ_{ow} | Tensão superficial produto-água ($dyne/cm$) |
| γ | Nº de Courant |
| ρ | Massa volúmica do fluido ($kg m^{-3}$) |
| ρ_e | Massa volúmica do produto derramado ($kg m^{-3}$) |
| ρ_o | Massa volúmica inicial do produto derramado ($kg m^{-3}$) |
| ρ_o | Massa volúmica do produto derramado ($kg m^{-3}$) |
| ρ_w | Massa volúmica da água ($kg m^{-3}$) |
| δ | Espessura da mancha (cm) |
| μ | Taxa de crescimento específico da biomassa (s^{-1}). |
| μ | Viscosidade dinâmica (cP) |
| μ_0 | Viscosidade dinâmica inicial (cP) |
| μ_{max} | Taxa de crescimento máximo da biomassa (s^{-1}) |

Lista de Abreviaturas

ADIOS – Automated Data Inquiry for Oil Spills
ASCII – American Standard Code for Information Interchange
BTEX – Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno, Xileno
CCMM – Centro de Control do Médio Mariño
CEDRE – Centre de Documentation de Recherche et d’Experimentation sul les
Pollution Accidentelles des Eaux
CNES – Centre Nationale d’Etude Spatiales
DAC – National Data Center
DEB – Departamento de Engenharia Biológica
DEC – Departamento de engenharia Civil
ECMWF – European Center for Médium-range Weather Forcast
ESRI – Environmental Systems Research Institute
ETOPO – Earth Topography
FORTRAN – Formula Translator
GDAC – Global Data Center
GMT – Greenwich Mean Time
GNOME – General NOAA Oil Modeling Environment
GODAE – Global Ocean Data Assimilation Experiment
GSHHS – Global Self-consistent, Hierarchical, High-resolution Shoreline Database
HAP – Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos
HAZMAT – Hazard Materials Response Division
HDF – Hierarchical Data Format
IFP – Institut Français du Petrol
JPL – Jet Propulsion Laboratory
LHRH – Laboratório de Hidraulica e Recursos Hidricos
NASA – National Aeronautics and Space Administration
NetCDF – Network Common Data Format
NOAA – National Oceanic and Atmospheric Administration
POM – Priceton Ocean Model
RMA – Resource Management Associates
SIG – Sistemas de Informação Geográfica
SIMDHAM – Sistema de Informação para a Modelação Matemática de Derrames de
Hidrocarbonetos em Ambiente Marinho

SMS – Surface-water Modeling System
SSV – Sólidos Suspensos Voláteis
WES-HL – Waterways Experiment Station
WOA – World Ocean Atlas

1. INTRODUÇÃO

1.1. Derrames petrolíferos e modelação matemática

Apesar dos grandes desenvolvimentos verificados nos últimos anos na procura de alternativas às fontes de energia convencionais, a nossa sociedade ainda baseia o seu desenvolvimento na utilização de combustíveis fósseis, assumindo particular importância o petróleo.

O movimento de petróleo desde a fonte até ao consumidor final envolve cerca de dez a quinze trasfegas para os diferentes meios de transporte marítimo e terrestre, sendo armazenado em diferentes locais para posterior transferência podendo os acidentes ocorrer em qualquer uma das operações de armazenamento e transporte. Os derrames de produtos petrolíferos são frequentes devido essencialmente às grandes quantidades utilizadas, estimando-se que são utilizadas no mundo inteiro 10 milhões de toneladas de petróleo, diariamente (Fingas, 2001).

A remoção de produtos petrolíferos derramados acarreta elevados custos. Estima-se que estes custos se situem entre US\$20 a US\$200 por litro derramado, dependendo do local e do tipo de produto petrolífero (Fingas, 2001). Nesta perspectiva, torna-se necessário gerir o risco de derrame de forma a minimizar ao máximo tanto o seu impacto negativo no meio ambiente, como os custos de limpeza.

O desenvolvimento das tecnologias informáticas, permite a utilização de novas ferramentas de gestão ambiental, adequadas ao processamento eficiente da grande quantidade de informação necessária ao apoio da gestão de derrames acidentais.

Destacam-se as ferramentas de modelação para previsão da evolução de manchas de hidrocarbonetos, permitindo a adopção de medidas mitigadoras dos impactos negativos associados aos derrames (Costa e Carmo, 1999; Pinho *et al*, 2002). A informação resultante das simulações realizadas com modelos quando integrada em ferramentas de Sistemas de Informação Geográfica (SIG) criando sistemas de informação, permite uma adequada análise dos resultados obtidos e serve de instrumento de apoio à gestão de derrames acidentais de produtos petrolíferos em águas marinhas.

Um sistema de informação é constituído por três componentes principais (**Figura 1.1**): uma componente em que é estruturada toda a informação de base envolvida neste tipo de estudos; outra componente formada por um conjunto de modelos matemáticos vocacionados para a modelação da hidrodinâmica e do transporte de manchas provocadas por derrames; e uma outra baseada numa ferramenta de SIG que permite a organização e análise de dados e resultados de modelos georeferenciados (Gomes *et al*, 2003a).



Figura 1.1 – Componentes de um sistema de informação.

1.2. Objectivos do trabalho desenvolvido

O trabalho desenvolvido no laboratório de Hidráulica e Recursos Hídricos (LHRH) do Departamento de Engenharia Civil da Universidade do Minho, visou criar um sistema de informação para a modelação matemática de derrames de

hidrocarbonetos em ambiente marinho agrupando e integrando informação de base e modelos matemáticos.

Neste trabalho descrevem-se as diversas componentes do SIMDHAM desenvolvido, nomeadamente: informação de base utilizada e respectivo processamento, metodologia de integração da informação georeferenciada num SIG e ferramentas de modelação integradas no sistema.

O SIMDHAM foi testado para o derrame do N/T Prestige ocorrido em Novembro de 2002 ao largo do noroeste da Península Ibérica.

1.3. Metodologia utilizada

O sistema criado foi desenvolvido através da integração das três componentes identificadas anteriormente: bases de dados, ferramentas de modelação e sistema de informação geográfica.

Esta integração foi realizada em várias fases. Numa primeira fase foram identificadas e caracterizadas as principais fontes de dados relevantes para o problema em estudo. Estas bases de dados foram agrupadas em três categorias: base de dados geográficos, base de dados ambientais e base de dados do derrame. Seguidamente foi determinado o conjunto de ferramentas de modelação mais adequadas ao sistema. Assim, foram integrados no sistema modelos para descrever os fenómenos de hidrodinâmica marinha, e de transporte (Euleriano e Lagrangeano) e degradação de produtos petrolíferos derramados no meio marinho.

Fez-se a comparação entre os dois modelos de transporte utilizados (modelo Euleriano e modelo Lagrangeano) através de um conjunto de simulações com a finalidade de determinar as suas potencialidades e limitações para a modelação de derrames de produtos petrolíferos.

Para além de um modelo já testado em várias situações de derrames de produtos petrolíferos, foram criados mais dois modelos para descrever a degradação de hidrocarbonetos baseados na implementação em código FORTRAN das equações descritivas do fenómeno.

Após o estabelecimento dos modelos, efectuou-se um trabalho de integração das várias ferramentas desenvolvidas, procedendo-se a uma definição do fluxo de informação para os modelos matemáticos e, posteriormente, para um SIG. Para isto foram utilizados programas informáticos de pré e pós processamento de informação. Desta forma criaram-se condições para uma melhor gestão de dados pelo utilizador final.

Esta metodologia foi testada através do estudo do derrame ocorrido em Novembro de 2002, com o petroleiro N/T Prestige ao largo do noroeste da Península Ibérica.

O trabalho desenvolvido organizou-se em seis capítulos, os quais são apresentados seguidamente:

O **capítulo 1** faz uma breve apresentação ao tema do trabalho, uma identificação do objectivo e descrição da metodologia utilizada.

O **capítulo 2** apresenta os conceitos necessários para compreender o desenvolvimento do SIMDHAM, nomeadamente, hidrodinâmica marinha e transporte e degradação de produtos petrolíferos no mar. São descritos e explicados os principais conceitos destes fenómenos e as suas formulações matemáticas.

No **capítulo 3** são apresentadas e caracterizadas as componentes do SIMDHAM. Em primeiro lugar são caracterizadas as principais informações de base relevantes para a criação do sistema, agrupadas consoante o seu tipo: dados geográficos, dados ambientais e dados do derrame. Cada base de dados foi identificada e caracterizada quanto aos seus dados, disponibilidade e formato da informação.

Posteriormente, apresentam-se os modelos de hidrodinâmica, transporte e degradação utilizados no SIMDHAM. Optou-se por recorrer a dois modelos de hidrodinâmica, o RMA2 (um modelo bidimensional no plano horizontal – 2DH) e o POM (um modelo *quasi*-tridimensional – 3D). Foram ainda seleccionados dois modelos de transporte, o RMA4 (modelo euleriano) e o GNOME (modelo lagrangeano). Para os processos de degradação seleccionou-se o modelo ADIOS2, e ainda dois modelos de

degradação físico-química (OILDEGRAD) e biológica (BIODEGRAD), implementados em código FORTRAN.

Seguidamente apresentou-se um conjunto de ferramentas de processamento de dados, capazes de garantir um fluxo de informação no SIMDHAM incluindo a sua apresentação em ambiente SIG.

No **capítulo 4** apresenta-se uma análise do funcionamento de algumas componentes do sistema. São analisadas e identificadas as principais características e limitações dos modelos de transporte euleriano e lagrangeano, realizando-se para isso um conjunto de simulações de derrames, de forma a efectuar-se uma análise comparativa.

Apresentam-se ainda as características mais relevantes dos modelos OILDEGRAD e BIODEGRAD, através de resultados de simulações realizadas.

O **capítulo 5** contém a aplicação do SIMDHAM ao caso da situação real do derrame do N/T Prestige ocorrido em Novembro de 2002. Apresentam-se as informações de base relevantes, aplicam-se os modelos de transporte para simular a deslocação da mancha e seguidamente simulam-se os processos de degradação físico-química e biológica das componentes do produto derramado.

As principais conclusões e propostas para desenvolvimentos futuros do trabalho são apresentadas no **capítulo 6**.

2. PROCESSOS DE TRANSPORTE E DEGRADAÇÃO DE HIDROCARBONETOS DERRAMADOS NO MEIO MARINHO

Neste capítulo apresentam-se os principais conceitos relativos aos processos físicos, químicos e biológicos cuja caracterização importa à modelação matemática do comportamento de hidrocarbonetos derramados em ambiente marinho.

2.1. Hidrodinâmica marinha

O movimento das águas oceânicas depende de um conjunto de fenómenos físicos que se apresentam variáveis no tempo e no espaço, resultando em padrões de circulação complexos responsáveis pelo transporte de hidrocarbonetos derramados no mar. Uma apresentação detalhada das formulações matemáticas das equações hidrodinâmicas pode ser encontrada em Pinho (2001).

Apresentam-se a seguir, de forma sucinta, as formulações matemáticas associadas aos principais agentes indutores da hidrodinâmica marinha.

2.1.1. Acções responsáveis pela hidrodinâmica marinha

O movimento das grandes massas oceânicas é condicionado por um conjunto de fenómenos físicos. As principais acções responsáveis pelas correntes oceânicas estão representadas de forma esquemática na **Figura 2.1**.

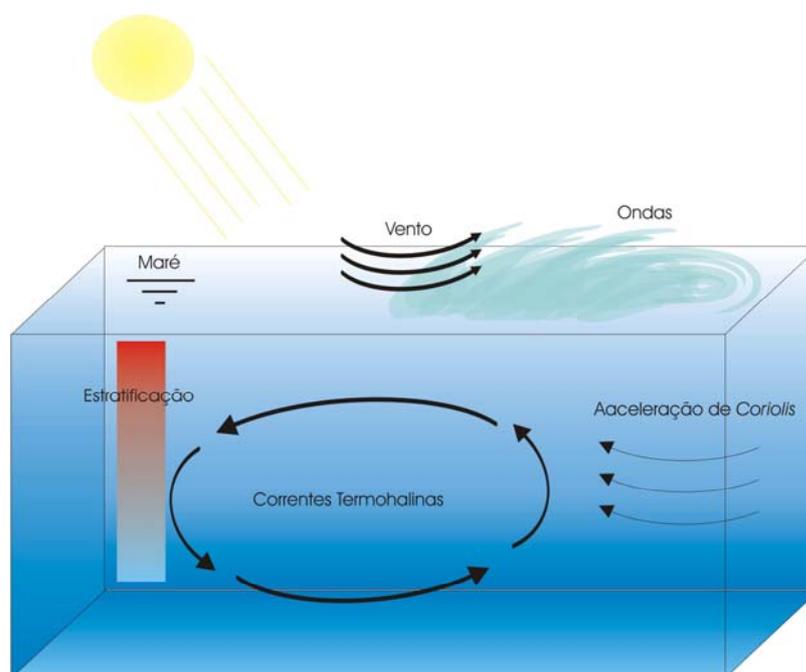


Figura 2.1 - Principais acções responsáveis pelas correntes oceânicas.

2.1.1.1. Correntes induzidas pelo vento e ondulação

As correntes induzidas pelo vento resultam da tensão exercida na superfície oceânica devido à deslocação de massas de ar. Esta deslocação é provocada pelos gradientes de pressão e temperatura do ar, principalmente através da acção do sol. A acção do vento sobre a superfície provoca ainda um regime de ondulação superficial. É de referir que a acção do vento é a principal responsável pelo deslocamento da camada superficial marítima, sendo por isso de extrema importância para o movimento de produtos petrolíferos derramados.

2.1.1.2. Correntes termohalinas e estratificação da coluna de água

As correntes termohalinas resultam da existência de uma estratificação da massa volúmica das águas oceânicas, que é dependente da temperatura, da salinidade e da pressão a que estão sujeitas as massas de água.

A estratificação térmica nos oceanos decorre da variação de temperatura na direcção vertical. A camada superficial apresenta-se como uma *zona de mistura* devido à acção do vento, podendo atingir algumas dezenas de metros de profundidades e caracteriza-se por ser uma zona isotérmica. Seguidamente, surge uma zona de variação

rápida da temperatura designada de *termoclina*. A maiores profundidades, a variação de temperatura é muito lenta, podendo considerar-se, também, uma zona quase isotérmica.

A salinidade pode ser definida como a quantidade total de sais dissolvidos na água, sendo o sal preponderante o cloreto de sódio. A salinidade varia com a bacia oceânica. Em bacias fechadas, onde os efeitos da evaporação se fazem sentir com maior intensidade os valores de salinidade apresentam-se mais elevados.

As correntes termohalinas resultam em movimentos de ascensão de massas de água menos densas e no afundamento de massas de água mais densas.

2.1.1.3. Correntes induzidas pela maré

As correntes induzidas pela maré são provocadas pela variação do nível da superfície livre oceânica. Essa variação é causada pelas forças de atracção de todos os astros, principalmente do sistema solar, sobre as massas de água da Terra. Devido à sua proximidade em relação à Terra, os astros com maior influência são a Lua e o Sol, podendo, habitualmente, desprezar-se a acção gravítica dos restantes astros. A Lua é o astro com maior influência dada a sua maior proximidade em relação à Terra. Um esquema simplificado da deformação da superfície terrestre provocada pela acção da Lua é apresentado na **Figura 2.2**.

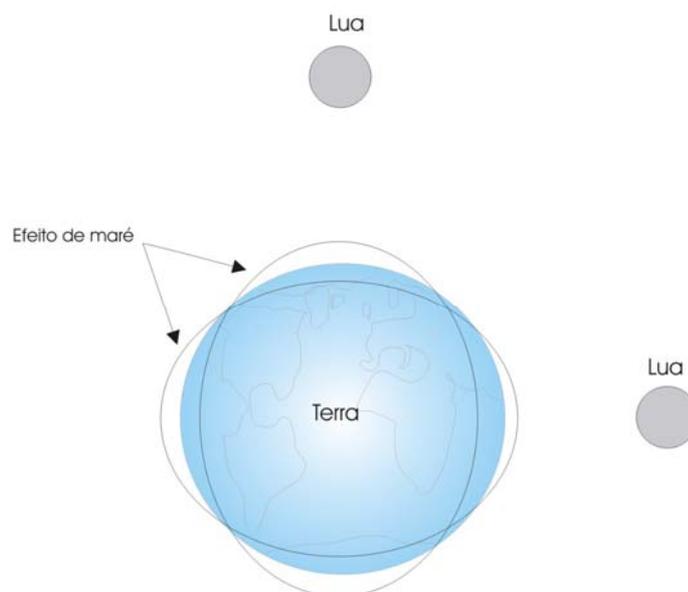


Figura 2.2 - Deformação da superfície terrestre provocada pela Lua

As intensidades das correntes resultantes da propagação das ondas de maré apresentam apenas valores significativos em regiões pouco profundas.

2.1.1.4. Aceleração de *Coriolis*

Outra acção com influência nas correntes marinhas é a que resulta da aceleração de grandes massas de fluidos devido ao movimento de rotação da Terra. Este fenómeno, efeito *Coriolis*, actua sobre grandes massas de água e de ar. Esta aceleração é tanto maior quanto menor for o raio da circunferência do plano perpendicular ao eixo de rotação da Terra e origina movimentos no sentido horário no hemisfério Norte e anti-horário no hemisfério Sul (**Figura 2.3**).

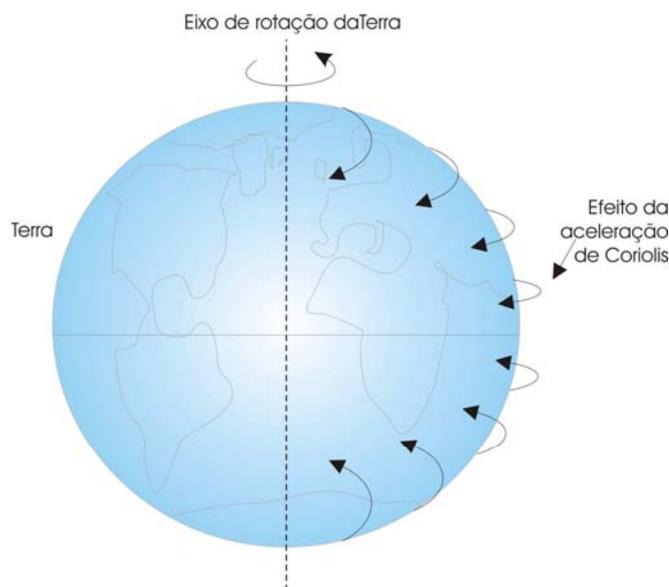


Figura 2.3 - Efeito da aceleração de *Coriolis* sobre as correntes marinhas

2.1.2. Equações de Movimento

As formulações descritivas do movimento de fluidos baseiam-se nos princípios básicos de mecânica formulados por Isaac Newton, posteriormente desenvolvidas por Euler e Bernoulli. De acordo com a 2ª lei de Newton:

$$F = m \times a \tag{2.1}$$

Onde F é a força ($kg\ ms^{-2}$); m massa (kg); e a aceleração (ms^{-2}).

O movimento de um volume elementar de um fluido incompressível e isotérmico expresso em termos de valores instantâneos das componentes de velocidades u , v e w e da pressão P , pode ser descrito pelas equações de Navier-Stokes:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \rho F_x - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (2.2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \rho F_y - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (2.3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \rho F_z - \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (2.4)$$

Onde F_x , F_y e F_z são as componentes das forças de volume por unidade de massa ($N \text{ kg}^{-1}$); P a pressão (Pa); μ o coeficiente de viscosidade dinâmica ($\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$); e ρ a massa volúmica do fluido (kg m^{-3}).

O movimento médio temporal de um fluido é caracterizado pelas equações de Reynolds, obtidas a partir das equações de Navier-Stokes:

$$\rho \left(\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} + \frac{\partial(\hat{u}\hat{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\hat{u}\hat{v})}{\partial y} + \frac{\partial(\hat{u}\hat{w})}{\partial z} \right) = \rho F_x - \frac{\partial \hat{P}}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{u'u'} + \frac{\partial}{\partial y} \overline{u'v'} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{u'w'} \right) \quad (2.5)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \hat{v}}{\partial t} + \frac{\partial(\hat{v}\hat{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\hat{v}\hat{v})}{\partial y} + \frac{\partial(\hat{v}\hat{w})}{\partial z} \right) = \rho F_y - \frac{\partial \hat{P}}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{v'u'} + \frac{\partial}{\partial y} \overline{v'v'} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{v'w'} \right) \quad (2.6)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \hat{w}}{\partial t} + \frac{\partial (\hat{w}\hat{u})}{\partial x} + \frac{\partial (\hat{w}\hat{v})}{\partial y} + \frac{\partial (\hat{w}\hat{w})}{\partial z} \right) = \rho F_z - \frac{\partial \hat{P}}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'w'}}{\partial z} \right) \quad (2.7)$$

Onde \hat{u} , \hat{v} e \hat{w} são médias temporais das componentes de velocidade ($m s^{-1}$); \hat{P} é a média temporal da pressão (Pa); e u' , v' e w' são flutuações das componentes da velocidade ($m s^{-1}$).

2.2. Transporte de massa

2.2.1. Transporte dispersivo e transporte advectivo

Os poluentes podem ser transportados no ambiente, em particular no meio hídrico, por processos a nível microscópico e a nível macroscópico. A nível microscópico, o principal mecanismo de transporte é a difusão molecular, movida por gradientes de concentração. A nível macroscópico, os processos de mistura (devidos a turbulência) e o movimento do fluido são os principais mecanismos responsáveis pelo transporte de massa.

Assim, consideram-se dois tipos de transporte: o transporte dispersivo devido à difusão molecular e a diversos mecanismos de mistura turbulenta, e o transporte advectivo associado ao transporte pelo meio fluido. Estes dois tipos de transporte são apresentados de forma esquemática na **Figura 2.4**.

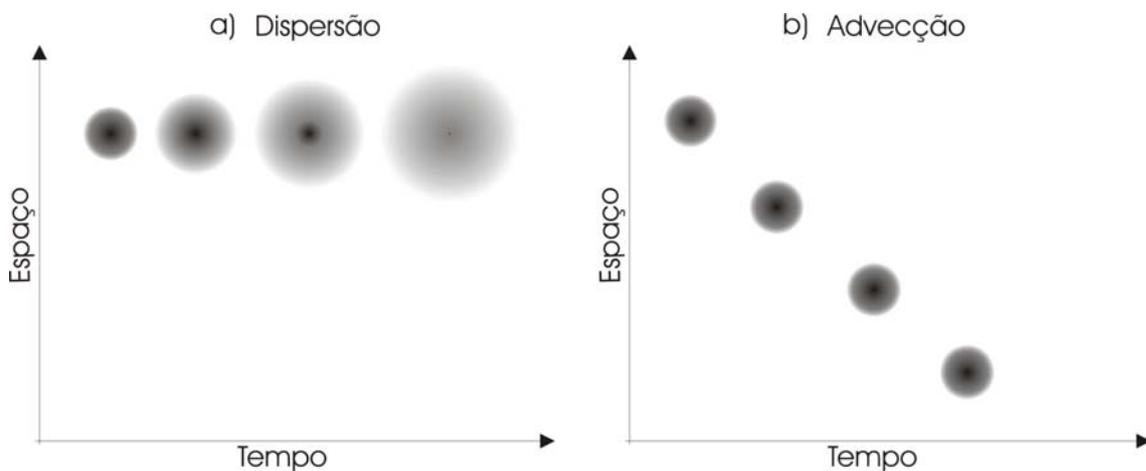


Figura 2.4 - Transporte de massa: a) dispersão e b) advecção.

2.2.1.1. Transporte dispersivo

O processo de difusão molecular pode ser descrito pela *primeira lei de Fick*:

$$J_x = -D \frac{dC}{dx} \quad (2.8)$$

Onde J_x é o fluxo de massa na direcção de x ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$), D o coeficiente de difusão molecular ($m^2\ s^{-1}$), e dC/dx o gradiente de concentração ($kg\ m^{-3}\ s^{-1}$). Isto significa que o fluxo de massa é directamente proporcional ao gradiente de concentração movido por um coeficiente de difusão. Este coeficiente possui um sinal negativo a indicar que o fluxo é positivo na direcção positiva do eixo dos xx .

Assim a variação temporal de um determinado constituinte devido ao transporte difusivo pode ser descrito pela *segunda lei de Fick*.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (2.9)$$

O transporte dispersivo, tal como referido anteriormente resulta da combinação de vários mecanismos. A sua formulação é idêntica à do transporte difusivo, utilizando um coeficiente de dispersão E ($m^2\ s^{-1}$) em vez do coeficiente de difusão D . A dispersão é motivada pela troca de quantidade de movimento entre porções vizinhas do fluido em regime turbulento.

Na **Figura 2.5** apresentam-se valores dos coeficientes de dispersão em meio hídrico e em meio sedimentar.

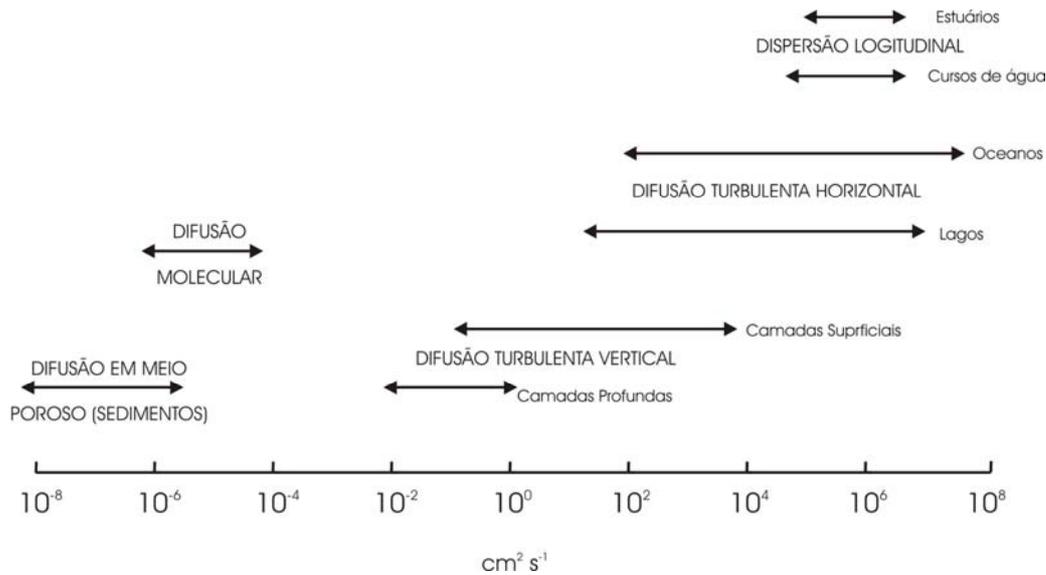


Figura 2.5 - Valores dos coeficientes de dispersão em meio hídrico e meio sedimentar (adaptado de Chapra, 1997)

2.2.1.2. Transporte advectivo

A advecção é o mecanismo pelo qual a matéria é transportada através das fronteiras do sistema pelo movimento do meio fluido em que se encontra. O fluxo de matéria que é transportada por advecção em determinada direcção, N_x ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$) é dado por:

$$N_x = v_x C \tag{2.10}$$

Onde v_x é a velocidade do meio ($m\ s^{-1}$) na direcção x e C a concentração do constituinte ($kg\ m^{-3}$).

2.2.2. Modelos de Transporte

Identificados os principais mecanismos responsáveis pelo transporte de poluentes no meio hídrico, importa ainda a questão de como estes podem ser modelados. O transporte de matéria no meio hídrico pode ser aproximado de duas formas distintas: **modelos Eulerianos** e **modelos Lagangeanos**.

2.2.2.1. Modelos Eulerianos

Os modelos Eulerianos descrevem a distribuição tridimensional de uma variável definida para uma localização espacial específica ao longo do tempo.

Os modelos Euleianos podem ser compreendidos considerando um sistema visualizado por um observador fixo (**Figura 2.6**).

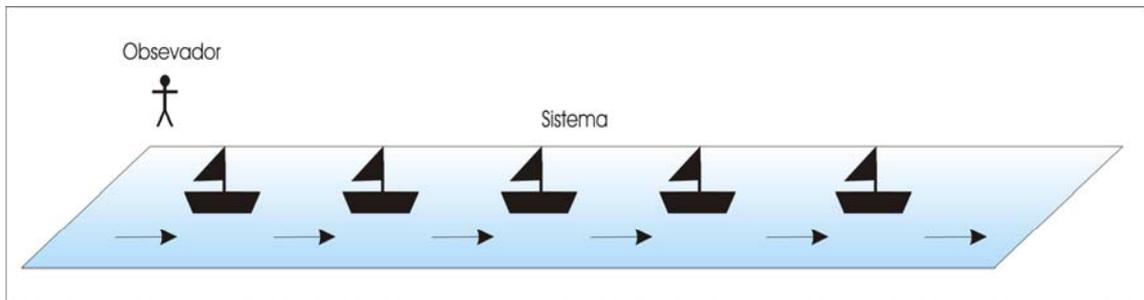


Figura 2.6 -Perspectiva do observador em relação a um sistema Euleriano.

Desta forma os modelos eulerianos são descritos por uma equação de transporte de massa:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(U_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(U_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(U_z C) - \frac{\partial}{\partial x}(E_x \frac{\partial C}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(E_y \frac{\partial C}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z}(E_z \frac{\partial C}{\partial z}) + S_i = 0 \quad (2.11)$$

Onde U_x , U_y e U_z são as componentes de velocidade do meio ($m s^{-1}$); E_x , E_y e E_z os coeficientes de dispersão para as três componentes tridimensionais ($m^2 s^{-1}$); e S_i um termo representativo das fontes e sumidouros do constituinte.

2.2.2.2. Modelos Lagrangeanos

Os modelos Lagrangeanos descrevem o movimento de uma variável no espaço e no tempo.

Nos modelos Lagrangeanos considera-se que o observador acompanha o movimento do sistema (**Figura 2.7**).

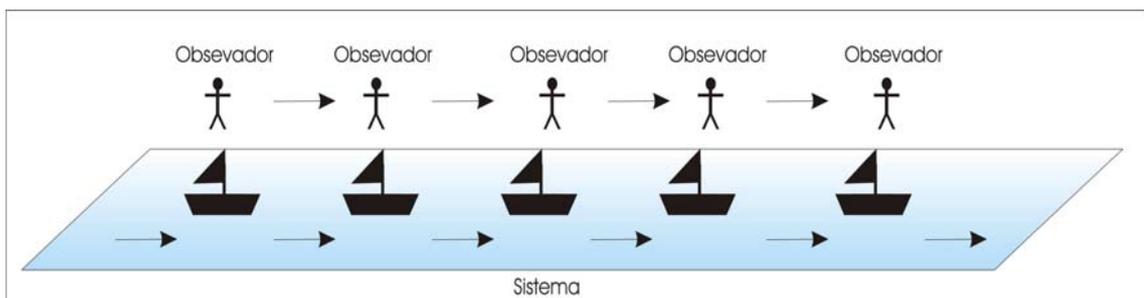


Figura 2.7 - Perspectiva do observador em relação a um sistema Lagrangeano.

Os modelos Lagrangeanos são descritos por equações do tipo:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = v(x, y, z) \quad (2.12)$$

Estas equações descrevem a variação temporal da posição de uma partícula (X) em função de um campo advectivo ($v(x,y,z)$).

2.3. Comportamento e características dos hidrocarbonetos em ambiente marinho

2.3.1. Propriedades físicas e composição química dos hidrocarbonetos

Os hidrocarbonetos derramados no ambiente marinho podem comportar-se de diversas formas. São as suas propriedades físico-químicas que determinam a forma como reagem aos diversos factores ambientais e a magnitude da sua perigosidade para o meio físico e para os seres vivos.

2.3.1.1. Propriedades Físicas

Estas propriedades podem ser descritas por uma série de modelos matemáticos (Costa e Carmo, 1999)

A viscosidade de um fluído está relacionada com a sua resistência em escoar-se. Quanto menor for a viscosidade, mais facilmente o fluido se movimenta. A viscosidade de um óleo é fortemente dependente da sua composição química. De uma forma geral, as fracções mais pesadas dos óleos possuem viscosidades mais elevadas enquanto as mais leves possuem viscosidades mais baixas. A viscosidade é fortemente influenciada pela temperatura, aumentando com a diminuição desta. Os processos de evaporação e emulsificação também são factores a ter em conta na alteração da viscosidade de um óleo.

A evolução da viscosidade dinâmica de um hidrocarboneto derramado no mar é descrita em Pinho *et al*, (2002):

$$\mu = C_{\mu} \mu_0 \frac{dF_e}{dt} + \frac{2.5 \mu_0}{1 - Y^F Y} \frac{dY}{dt} \quad (2.13)$$

Sendo μ_0 a viscosidade dinâmica inicial (cP); C_μ a taxa de recuperação mecânica do produto ao longo do tempo, tomando valores de 1 para gasolina a 15 para crudes pesados; dF_e/dt e dY/dt as taxas de evaporação e emulsificação respectivamente; e Y^F a fracção final de água incorporada na massa de hidrocarboneto através do processo de emulsificação.

A massa volúmica é a propriedade utilizada pela indústria petrolífera para definir o crude como leve ou pesado. Esta propriedade é ainda importante, dado que é determinante para um determinado produto flutuar ou afundar em meio líquido. Em meio marinho, a massa volúmica média da água é de aproximadamente 1.03 g/cm^3 , enquanto a da maioria dos óleos varia entre 0.7 e 0.99 g/cm^3 , o que explica a razão dos produtos flutuarem quando derramados no mar.

A variação da massa volúmica pode ser dada por (Pinho *et al*, 2002):

$$\rho_e = Y\rho_w + (1 - Y)(\rho_o + Y^F F_e) \quad (2.14)$$

Onde ρ_e é a massa volúmica do produto (g/cm^3); ρ_w a massa volúmica da água (g/cm^3); e ρ_o a massa volúmica inicial do produto derramado (g/cm^3).

A área e o volume do produto derramado variam devido à dispersão natural no meio. O processo de emulsificação contribui para o aumento do volume devido a incorporação de água na massa de produto derramado. A evaporação contribui para a diminuição do volume por perdas de constituintes.

A variação de volume do produto derramado pode ser expressa por (Pinho *et al*, 2002):

$$\frac{dV_o}{dt} = -V_{o0} \frac{dF_e}{dt} - Y_d V_o \quad (2.15)$$

Sendo dF_e/dT a variação da fracção evaporada; Y_d a taxa de perdas por dispersão vertical; e V_{o0} o volume inicial de hidrocarboneto derramado no mar.

O crescimento da área da mancha poderá ser modelado utilizando-se a seguinte expressão (Mackay *et al*, 1980):

$$\frac{dA_o}{dt} = K_1 A_o^{1/3} \left[\frac{V_o}{A_o} \right]^{4/3} \quad (2.16)$$

Em que A_o é a área da mancha (m^2), V_o é o volume da mancha (m^3), K_1 é uma constante relativa ao aumento da área.

2.3.1.2. Composição Química

Os óleos são misturas de hidrocarbonetos de diferentes tipos. Variam desde os hidrocarbonetos de estrutura mais simples aos mais complexos. A composição varia de acordo com as formações geológicas da região onde são encontrados, apresentando uma grande influência no comportamento dos óleos quando derramados em meio marinho.

Uma vez que os hidrocarbonetos são os principais constituintes dos óleos, os elementos mais encontrados são o carbono e o hidrogénio. De acordo com o tipo de óleo, podem ser encontrado outros compostos, como o enxofre, azoto, oxigénio, sais minerais e metais como o níquel, vanádio e crómio.

Podem ser encontradas diversas classes de hidrocarbonetos, de acordo com sua estrutura química (**Quadro 2.1**).

Os hidrocarbonetos saturados são essencialmente alcanos, que são compostos de carbono e hidrogénio com o número máximo de átomos de hidrogénio ligados a cada átomo de carbono. No caso de compostos onde existam átomos de carbono ligados entre si por ligações duplas ou triplas, significa que estes átomos de carbono não estão ligados ao número máximo de átomos de hidrogénio. Nestes casos os compostos classificam-se como compostos insaturados.

Quadro 2.1 - Principais classes de hidrocarbonetos encontrados nos óleos (adaptado de Fingas, (2001))

| <i>Grupo</i> | <i>Subgrupo</i> | <i>Exemplo</i> |
|-------------------|-----------------|---|
| Saturados | Alcanos | Butano Hexano |
| | Cicloalcanos | Ciclohexano Tetrahidronaftaleno |
| | Ceras | Alcanos de cadeia longa |
| Aromáticos | BTEX | Benzeno Tolueno |
| | PAH | Naftaleno Fenatreno |
| Compostos polares | Resinas | Tiois Decanomercaptano |
| | Asfaltenos | (compostos polares de cadeia muito longa) |

Os compostos aromáticos são aqueles que são constituídos por pelo menos um anel de benzeno (**Figura 2.8**).



Figura 2.8 -Exemplos de estruturas de alguns Compostos Aromáticos

Estes compostos, devido às suas características químicas de elevada estabilidade, são bastante persistentes no ambiente. Os aromáticos mais comuns são normalmente referidos como BTEX, iniciais de benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno e são todos derivados do benzeno, ou seja possuem apenas um anel aromático.

Os compostos que possuem mais de um anel aromático são os Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (HAP's). Estes representam normalmente de 0 a 60% dos óleos, têm uma elevada persistência no ambiente e apresentam uma elevada toxicidade para os seres vivos.

Os compostos polares são aqueles que possuem uma carga molecular significativa resultante da ligação com compostos como o enxofre, azoto ou oxigénio. Os compostos polares mais pequenos são chamados de resinas. Os compostos mais longos são os asfaltenos.

2.3.2. Envelhecimento

A degradação dos hidrocarbonetos, normalmente referida como envelhecimento (do termo inglês *weathering*), deriva da acção de fenómenos físicos, químicos e biológicos sobre aqueles produtos (**Figura 2.9**).

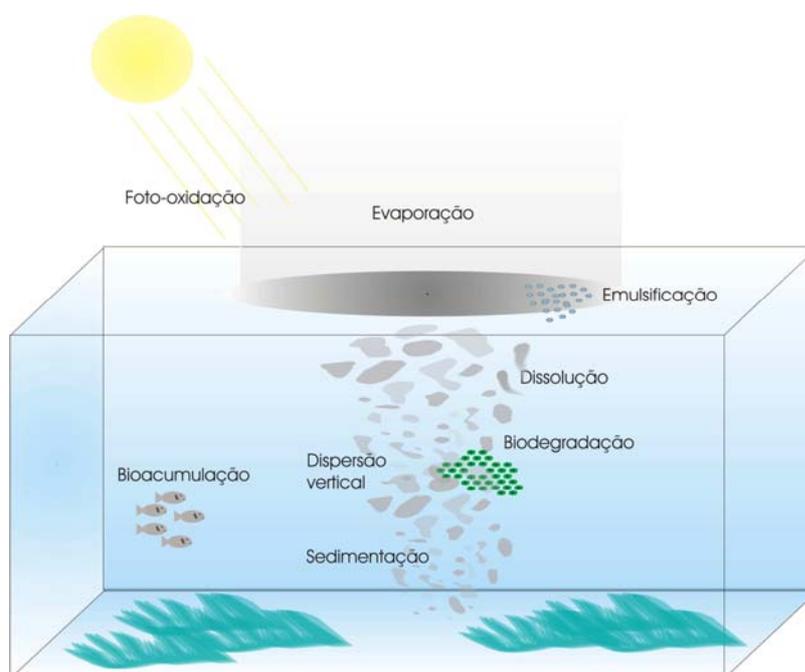


Figura 2.9 - Principais fenómenos de envelhecimento associados a derrames de produtos petrolíferos no mar

2.3.2.1. Degradação física e química

No processo de dissolução, os compostos mais solúveis perdem-se para a coluna de água. Apenas uma pequena quantidade dos compostos se dissolve (normalmente a uma taxa muito baixa). Desta forma, a fracção de produto dissolvida não é muito significativa no balanço final da massa de um derrame. No entanto, os compostos solúveis são normalmente tóxicos para as espécies marinhas (mesmo em baixas concentrações).

A foto-oxidação ocorre quando, por acção da energia solar, reacções modificam a estrutura química de alguns compostos. Estes mecanismos ainda não são bem conhecidos, apesar de alguns tipos de óleos serem mais susceptíveis de sofrer foto-oxidação do que outros. Para a maioria dos óleos este processo não é considerado importante para o balanço final da massa de um derrame.

A perda por dispersão vertical é provocada pelo efeito da gravidade sobre porções de maior massa volúmica que se desprendem da mancha principal, podendo ser dada pela equação (Mackay *et al*, 1980):

$$Y_d = \frac{0.11(U_v + 1)^2}{1 + 50\mu \delta \gamma_{ow}} \quad (2.17)$$

Onde μ é a viscosidade dinâmica (*cP*); δ a espessura da mancha (*m*), e γ_{ow} a tensão superficial produto-água (*dynes/cm*). A espessura δ pode ser aproximada por V_o/A_o onde V_o é o volume do óleo (*m³*); e A_o a área superficial do óleo (*m²*).

A evaporação pode ser descrita segundo duas formulações: o modelo de pseudo-componentes e o modelo analítico.

O modelo de pseudo-componentes é dado por (Bobra, 1992) e descreve o processo de evaporação para um componente individual da mistura de hidrocarbonetos:

$$\frac{dm_i}{dt} = K_p A \frac{X_i M_i P_i}{RT} \quad (2.18)$$

Onde m_i (*kg*) é a massa do componente *i*; K_p é o coeficiente de transferência de massa dado por $K_p = 2.5 \times 10^{-3} U_v^{0.78}$ (*ms⁻¹*); A é a área do derrame (*m²*); X_i é a fracção molar do constituinte *i*; M_i a massa molar desse constituinte (*g mol⁻¹*); P_i a pressão de vapor desse constituinte (*atm*); R a constante dos gases perfeitos; e T a temperatura absoluta (*°K*).

No modelo analítico de evaporação, a fracção de perdas por evaporação (F_e) é determinada a partir da seguinte equação (Buckanan e Hurford, 1988):

$$\frac{dF_e}{dt} = \frac{K A_o}{V_o} \exp\left[A - \frac{B}{T}(T_0 + T_G F_e)\right] \quad (2.19)$$

Onde, $K = 2.5 \times 10^{-3} U_v^{0.78}$; T = temperatura do produto ($^{\circ}K$); T_0 = temperatura inicial (quando $F_e = 0$); $A = 6.3$; $B = 10.3$; T_G = gradiente da curva de destilação ($^{\circ}K$); μ = viscosidade dinâmica (cP); A_o = área da mancha (m^2); e V_o = volume de produto petrolífero (m^3).

O processo de emulsificação resulta da incorporação de partículas de água no produto petrolífero e apresenta a seguinte formulação (considerando Y como a fração de água no produto petrolífero):

$$\frac{dY}{dt} = 2.0 \times 10^{-6} (U_v + 1)^2 \left(1 - \frac{Y}{Y^F}\right) \quad (2.20)$$

Y^F é a fração de água final do processo de emulsificação (0.70 para crudes pesados e 0.25 para frações leves de petróleo); U_v a velocidade do vento ($m s^{-1}$).

2.3.2.2. Biodegradação

A biodegradação é o processo pelo qual os compostos de origem orgânica podem ser oxidados através de processos biológicos promovidos por microrganismos. Teoricamente, todos os compostos orgânicos são susceptíveis de serem degradados por algum tipo de microrganismos. No entanto, existem compostos que apresentam taxas de biodegradação tão baixas, que normalmente se considera que não se degradam.

O desenvolvimento de áreas científicas emergentes, como é o caso da biotecnologia, tem permitido o avanço do conhecimento dos fenómenos envolvidos na biodegradação de compostos persistentes.

A maioria dos compostos químicos presentes em produtos petrolíferos são resistentes aos processos de degradação biológica, ou seja, degradam-se a uma taxa muito baixa. Um exemplo deste tipo de compostos encontrados nos produtos petrolíferos e que são representativos dos mecanismos de degradação biológica em derrames petrolíferos, são os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (HAP's).

Uma vez que os processos biológicos apenas podem ocorrer em meio líquido (em meio terrestre os microrganismos recorrem a estratégias como a produção de biofilmes de interface líquida), a biodegradação também está limitada pela transferência dos compostos orgânicos para a fase líquida, ou seja, está limitada pela sua biodisponibilidade através da dissolução (transferência de massa da fase sólida para a fase aquosa).

O crescimento da biomassa (quantidade de microrganismos, B) poderá ser modelada por uma lei de 1ª ordem na forma:

$$\frac{dB}{dt} = \mu B \quad (2.21)$$

Onde μ é a taxa de crescimento específico da biomassa (s^{-1}). Este crescimento é limitado pela quantidade de alimento (composto que vai ser degradado) disponível e pode ser descrito por uma equação do tipo Michaelis-Menten:

$$\mu = \mu_{\max} \left(\frac{C}{K_s + C} \right) \quad (2.22)$$

Onde C é a concentração do composto; μ_{\max} é taxa de crescimento máximo da biomassa (s^{-1}); e K_s é a concentração de semi-saturação ($mg\ m^{-3}$) (concentração de substrato quando μ é metade do μ_{\max}).

Desta forma a degradação biológica de um composto pode ser descrito por:

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\mu}{Y} B \quad (2.23)$$

Onde Y é o coeficiente de rendimento da biomassa (M de biomassa produzida/ M de substrato consumido).

Como foi referido anteriormente, a biodegradação de determinados compostos é limitada pela transferência de massa para as células. De forma a integrar esta transferência deve ter-se em consideração o consumo limitado pela biodisponibilização.

As formulações utilizadas são descritas em Grimberg *et al.* (1996), Bosma *et al.* (1997) e Wick *et al.* (2001) para a degradação de HAP's. A transferência de massa do substrato em fase não líquida, para substrato biodisponível pode ser dada por:

$$\frac{dC_r}{dt} = -k_r C_r \quad (2.24)$$

Onde C_r é a concentração de substrato não disponível para a degradação biológica e k_r uma constante de transferência de massa para a fase biodisponível. A constante k_r é dependente da taxa de dissolução e da diferença entre concentração de máxima solubilidade do substrato e a concentração actual no meio, podendo ser dada por:

$$k_r = k(C_{\max} - C) \quad (2.25)$$

Onde, C é a concentração de substrato biodisponível ($mg\ m^{-3}$); C_{\max} é a concentração máxima de substrato no meio ($mg\ m^{-3}$) e $k = k_d \times A_{sw}$ é uma constante de transferência de massa do substrato para a célula ($m^3\ s^{-1}$) (k_d é a taxa de dissolução do substrato em meio aquoso ($m\ s^{-1}$) e A_{sw} é a área de contacto líquido/sólido (m^2)).

Desta forma o consumo de substrato biodisponível pode ser descrito por:

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\mu_{\max}}{Y} \left(\frac{C}{K_s + C} \right) B + k(C_{\max} - C) C_r \quad (2.26)$$

Assim, a concentração devida ao consumo da fracção biodisponível de um HAP pode ser descrita como o resultado da variação da concentração devido ao consumo microbiano e da variação da concentração de substrato biodisponível devida a dissolução.

2.3.3. Toxicidade

O petróleo pode afectar negativamente os organismos através de acções físicas, alterações do habitat e acções tóxicas. Os compostos aromáticos são os principais responsáveis pela toxicidade dos produtos petrolíferos. Os compostos aromáticos com

maior número de anéis possuem características de maior toxicidade do que outros. Dentro destes, os HAP's apresentam-se como os mais perigosos devido à sua persistência no ambiente.

Os mecanismos de toxicidade são reconhecidos por interferirem com as funções da membrana celular e com os sistemas enzimáticos associados à membrana. O **Quadro 2.2** apresenta alguns efeitos de toxicidade de produtos petrolíferos.

Quadro 2.2 - Efeitos do Petróleo ou de HAP's individuais em diversos organismos (adaptado de Hoffman et al, 2003)

| Efeito | Tipo de Organismo | | | | | |
|--|-------------------------------|---------------|--------|---------------------|----------|-----------|
| | Plantas e Micróbios | Invertebrados | Peixes | Repteis or Anfíbios | Pássaros | Mamíferos |
| | Organismos Individuais | | | | | |
| Morte | X | X | X | X | X | X |
| Reprodução alterada | X | X | X | X | X | X |
| Crescimento e desenvolvimento enfraquecido | X | X | X | X | X | |
| Alteração de taxas de fotossíntese | X | | | | | |
| Alteração de ADN | X | X | X | X | X | X |
| Malformações | | | X | | X | |
| Lesões e Tumores | | X | X | X | | X |
| Cancro | | | X | X | | X |
| Sistema imunitário enfraquecido | | | X | | X | X |
| Funções endócrinas alteradas | | | X | | X | |
| Comportamentos alterados | | X | X | X | X | X |
| Alterações sanguíneas | | X | X | X | X | X |
| Alterações do fígado e rins | | | X | | X | X |
| Hipotermia | | | | | X | X |
| Inflamação do tecido epitelial | | | | X | X | X |
| Respiração ou ritmo cardíaco alterado | | X | X | X | | |
| Glândula salina enfraquecida | | | | X | X | |
| Hiperplasia das brânquias | | | X | | | |
| erosão da barbatana | | | X | | | |
| | Grupo de Organismos | | | | | |
| Alteração da população local | X | X | X | | X | X |
| Alteração da estrutura da comunidade | X | X | X | | X | X |
| Alteração da biomassa | X | X | X | | | |

Os compostos tóxicos podem, para além de uma acção directa, incidir sobre diversos organismos ao longo da cadeia alimentar, através da sua acumulação nos tecidos vivos. Este processo, bioacumulação, constitui o principal efeito com possibilidade de afectação dos seres humanos que se alimentam dos recursos marinhos.

3. SISTEMA DE INFORMAÇÃO DESENVOLVIDO (SIMDHAM)

A estrutura organizacional do SIMDHAM encontra-se descrita na **Figura 3.1**. As suas componentes foram organizadas em três grandes grupos: bases de dados, ferramentas de modelação e sistema de informação geográfica.

As bases de dados foram organizadas de acordo com a informação que comportam, e de acordo com as suas fontes, para que, facilmente, sejam actualizadas e complementadas. As ferramentas de modelação estão organizadas segundo a sua tipologia, para que sejam seleccionadas de acordo com o tipo de modelo que se pretenda utilizar.

As ferramentas de processamento de dados foram agrupadas com as ferramentas de modelação para simplificar o sistema, e uma vez que a sua utilização está directamente relacionada com a utilização dos modelos matemáticos.

Os SIG associados a cada caso de estudo são construídos com o programa *ArcView*.

3.1. Bases de dados

Apresentam-se a seguir as principais bases de dados incluídas no Sistema de Informação criado. Estas são agrupadas em três grandes conjuntos: dados geográficos, dados ambientais e dados do derrame. No **Anexo A** encontra-se uma descrição dos conteúdos das bases de dados, suas origens e localização no Sistema.

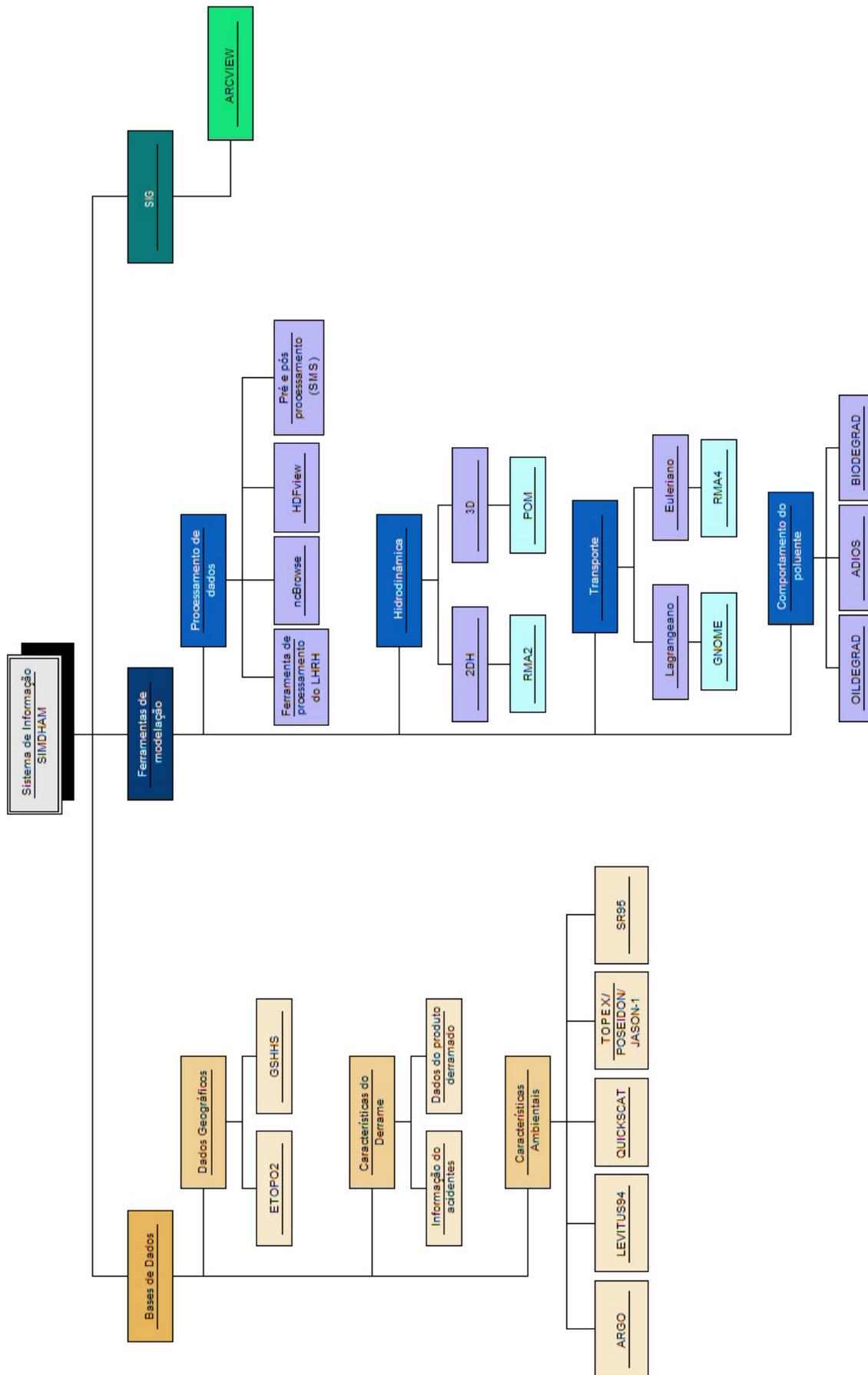


Figura 3.1 - Organização dos componentes do sistema de informação

3.1.1. Dados Geográficos

Os dados relativos à geografia do local onde ocorre um derrame são de extrema importância. Através destes são definidas as fronteiras do sistema e a topografia do fundo marinho.

3.1.1.1. ETOPO2

Esta é uma base de dados de topografia a nível global com uma resolução de 2 minutos (latitude e longitude). As principais fontes para a constituição da base de dados oceânicos ETOPO2 foram a base de dados "*Smith/Sandwell*", uma base de dados de resolução espacial de 2 minutos da batimetria oceânica derivada de medições realizadas através de radar colocado em satélite em 1978 (Smith e Sandwell, 1997) e o *International Bathymetric Chart of the Arctic Ocean (IBCAO)*, que contem toda a batimetria disponível a norte dos 64° N. Esta base é utilizada por mapeadores, investigadores e outros cujo trabalho dependa de um conhecimento preciso da topografia do leito do mar Ártico (Jakobsson *et al*, 2000).

Estes dados encontram-se disponíveis num formato digital específico, sendo por isso necessário processá-los para utilização nas ferramentas de modelação. O processamento destes dados está implementado na ferramenta de processamento de dados, especificamente desenvolvida para tal e que será apresentada no ponto 3.4.2.2. Na **Figura 3.2** apresenta-se um exemplo da batimetria oceânica para uma região do Atlântico tal como consta da base ETOPO2 (NOAA, 2003b).

3.1.1.2. GSHHS

A *Global Self-consistent, Hierarchical, High-resolution Shoreline Database (GSHHS)* (Wessel e Smith, 1996) é uma base de dados de alta resolução de linhas de costa (interface de separação entre águas marinhas e principais massas de água doce e terra). Os dados incluídos nesta base foram submetidos a um extenso processamento, de forma a evitarem-se inconsistências internas tais como pontos de linhas de costa com localização errada e segmentos cruzados. As linhas de costa são representadas inteiramente por polígonos fechados hierarquicamente organizados. Desta forma o

acesso aos dados apresenta-se mais eficaz, simplificando-se as tarefas de buscas e selecção de dados.

Estes dados podem ser igualmente processados pela ferramenta de processamento de dados criada, podendo ser seleccionada a área e a resolução que se pretende. A **Figura 3.3** apresenta as linhas de costa de alta resolução para a península Ibérica.

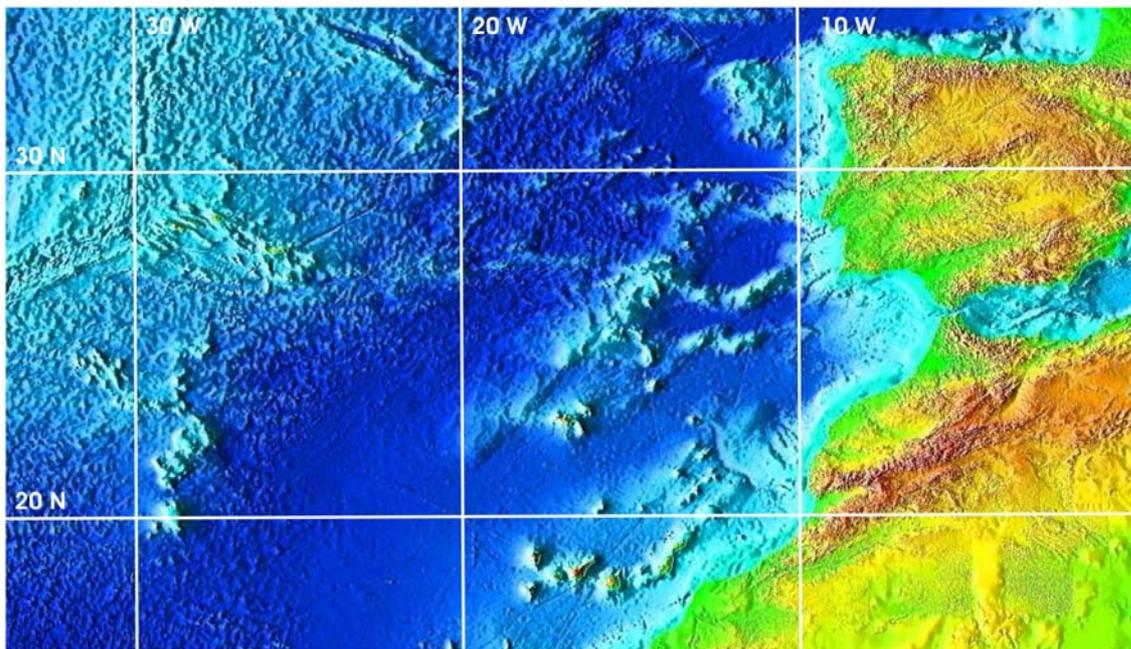


Figura 3.2- Dados de altimetria e batimetria da ETOPO2 (adaptado de NOAA (2003b))

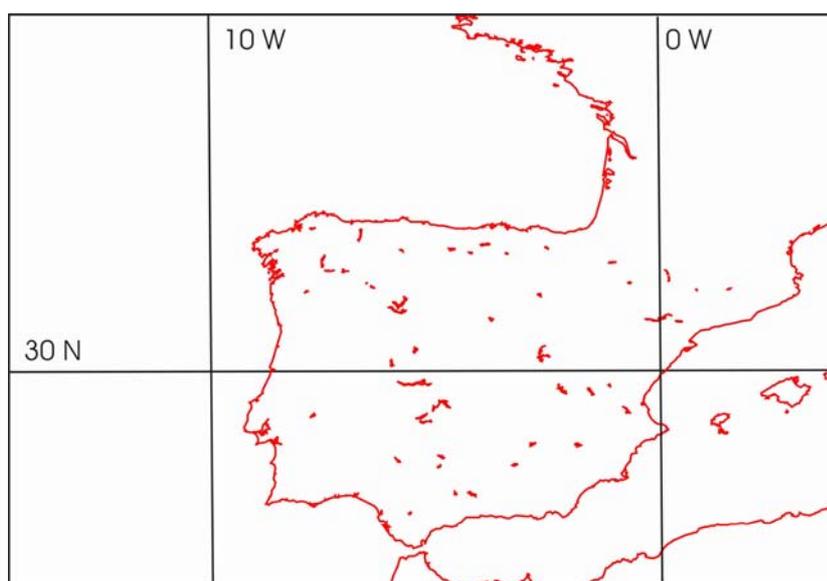


Figura 3.3 - Dados de linhas de costa de alta resolução da base de dados GSHHS para a Península Ibérica

3.1.2. Dados Ambientais

Os dados ambientais referem-se a informações relativas a diversos parâmetros caracterizadores do ambiente marinho no local de ocorrência do derrame de hidrocarbonetos. São considerados parâmetros tais como, temperatura da água, salinidade da água, marés, agitação marinha, massa volúmica, correntes marinhas e direcção e velocidade dos ventos.

A base de dados não se encontra organizada segundo os diferentes parâmetros considerados, mas antes segundo a fonte que está na sua origem. A opção por este tipo de organização deve-se à intenção de agrupar os dados segundo a mesma tipologia e formatação (decorrentes da sua fonte comum) para que as operações de processamento sejam mais facilmente organizadas.

São apresentadas a seguir as fontes utilizadas na criação da base de dados de características ambientais, a sua organização e tipologia, e os parâmetros que incluem.

3.1.2.1. ARGO

O projecto *Argo* compreende um método de recolha de informação da camada superficial oceânica através de uma frota de “robôs flutuantes” (Fratantoni, 2001). Estas bóias andam à deriva a uma profundidade de 1 a 2 *km*, e a cada 10 dias, cada uma das bóias emerge registando os perfis para diferentes níveis de pressão, de temperatura e de salinidade. Estes dados e a posição geográfica da bóia são transmitidos via satélite quando esta atinge a superfície, para posteriormente submergir e iniciar um novo ciclo. A deriva das bóias submersas permite estimar as correntes responsáveis pelo transporte de massa e calor através de bacias oceânicas. A **Figura 3.4** mostra um esquema de funcionamento das bóias, tal como descrito anteriormente.

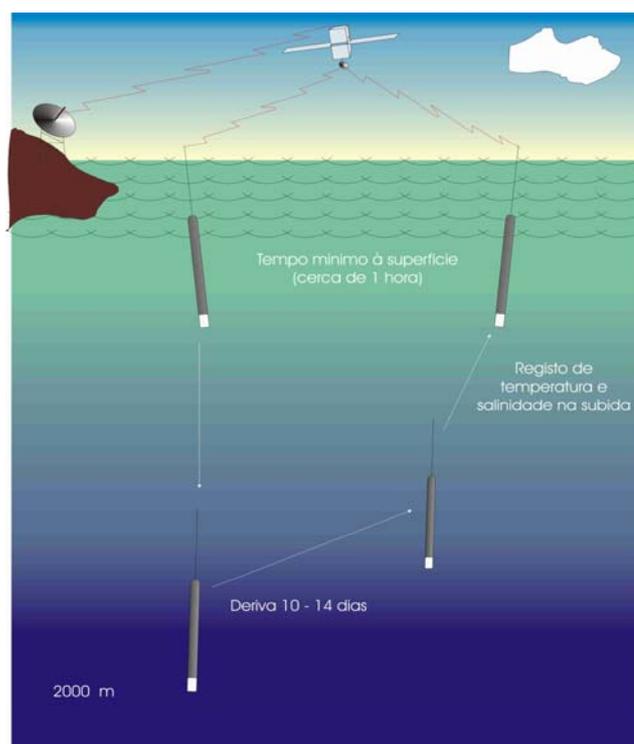


Figura 3.4 - Funcionamento das bóias (adaptado de <http://Argo.jcommops.org>)

A rede ARGOS é da responsabilidade de 18 países e constituída por cerca de 3000 bóias, responsáveis pelo registo de 100000 perfis de pressão, temperatura e de salinidade e medidas de velocidade de referência. O principal objectivo deste projecto é providenciar uma descrição quantitativa do estado envolvente da camada superficial do oceano e os padrões de variabilidade climática, incluindo o transporte e armazenamento de calor e massas de água.

Os dados são disponibilizados em diversos formatos pelos DAC's (*National Data Centers*) e GDAC's (*Global Data Centers*), sendo mais comum o formato NetCDF (Carval, 2002). Ligações a esses centros e mais informações relativas ao projecto podem ser encontradas no *Argo Information Center* (<http://Argo.jcommops.org>).

Estes dados podem ser visualizados directamente nos sítios dos centros de informação em plataformas SIG e em formato de gráficos descritores dos parâmetros seleccionados (**Figura 3.5** e **Figura 3.6**).

Para além desta forma de análise de dados, a informação pode ser recolhida das fontes indicadas anteriormente, e a partir daí serem analisadas da forma desejada. Para a

análise destes dados são utilizadas ferramentas de processamento de dados no formato NetCDF, as quais serão descritas no capítulo 4.

A título de exemplo, apresentam-se os perfis de temperatura e salinidade registados numa bóia ao largo da costa portuguesa, e ainda a sua trajetória. (**Figura 3.7**). Os dados de temperatura estão expressos em °C, os de salinidade em *psu* e os de pressão em *bar*.



Figura 3.5 - Visualização de trajetórias e perfis registados on-line (extraído de <http://Argo.jcommops.org>) (as diferentes cores representam as diferentes origens das bóias)

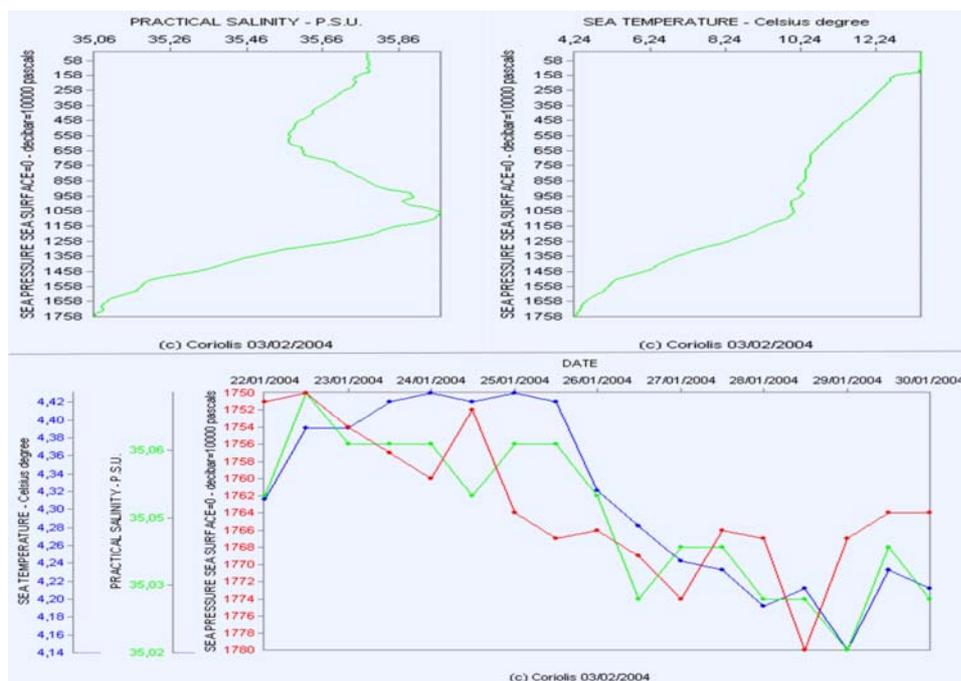


Figura 3.6 - Visualização de perfis registados on-line (extraído de <http://Argo.jcommops.org>)

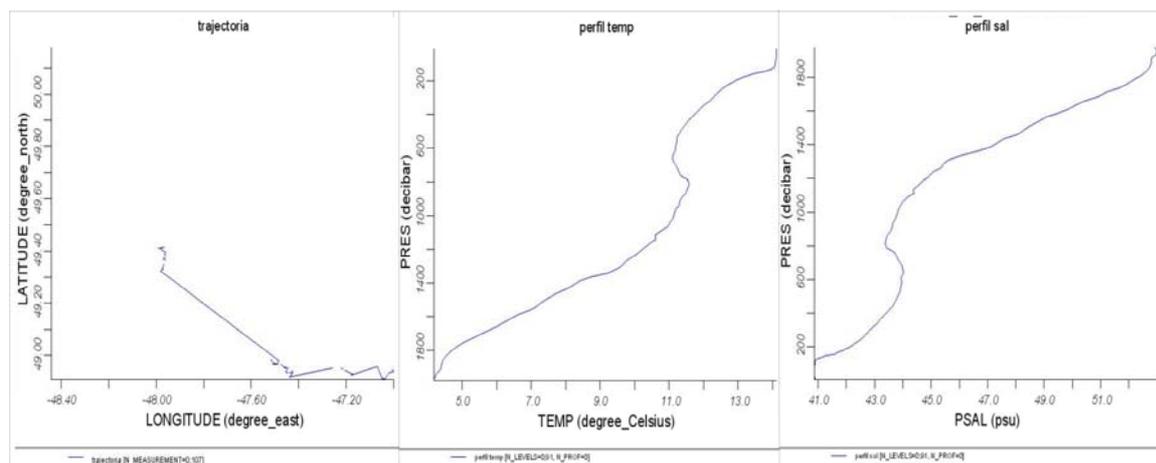


Figura 3.7 – Trajectória das bóias e perfis de temperatura e salinidade registados pelo utilizador

A aquisição dos dados pode ser feita mediante diversos critérios, desde os dados individuais de cada bóia, aos dados de toda uma região (por ex. oceano Atlântico) em determinada data. No sítio do *US Global Ocean Data Assimilation Experiment*, (www.usgodae.org/cgi-bin/argo_select.pl), é possível realizar uma selecção dos dados de bóias de acordo com a localização geográfica e a data. Esta escolha da organização dos dados permite ao utilizador obter os dados que mais interessam para sua análise. No Sistema de Informação construído estão armazenadas bases de dados diárias de registos de perfis de temperatura e salinidade, e de trajectórias desde Julho de 2002 para o oceano Atlântico e ainda de trajectórias para localizações previamente especificadas de acordo com cada projecto. Cada ficheiro NetCDF, possui os dados relativos a todas as bóias que efectuaram registos naquele dia na área geográfica seleccionada (Carval, 2002).

3.1.2.2. World Ocean Atlas

O *National Oceanographic Data Center* da *National Oceanic and Atmospheric Administration* (EUA) possui uma base de dados sobre características ambientais oceânicas designada por *World Ocean Atlas* (WOA) (NOAA, 2003a). No sistema apresentado foram obtidas duas versões desta base de dados, a *Levitus 94* e o *WOA01*.

A base de dados *Levitus 94* (Levitus et al, 1994; Levitus e Boyer, 1994) descreve a características de temperatura, salinidade e de massa volúmica potencial do oceano. Apresenta médias mensais destes parâmetros tendo em conta dados recolhidos até 1994. Os dados encontram-se no formato NetCDF.

A **Figura 3.8** apresenta os dados de temperatura, salinidade e massa volúmica potencial do mês de Janeiro desta base de dados para a superfície oceânica observados através da ferramenta de visualização *ncBrowse*.

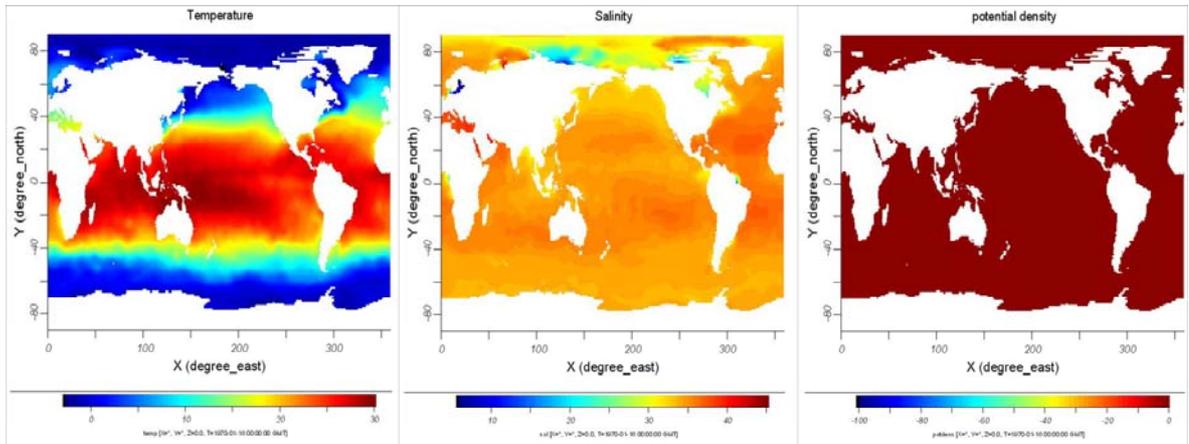


Figura 3.8 - Dados de temperatura, salinidade e massa volúmica potencial da base de dados Levitus94

A base *WOA01* é uma base de dados mais actual (dados até 2001), encontrando-se no SIMDHAM, os dados relativos a médias mensais de temperatura, salinidade e oxigénio dissolvido. Estes dados encontram-se em formato ASCII, podendo ser processados por uma ferramenta específica escrita em código FORTRAN que permite exportar os dados em formato de colunas (latitude, longitude, valor).

A **Figura 3.9** apresenta como exemplo, os dados de temperatura, salinidade e oxigénio dissolvido da camada superficial para o mês de Janeiro.

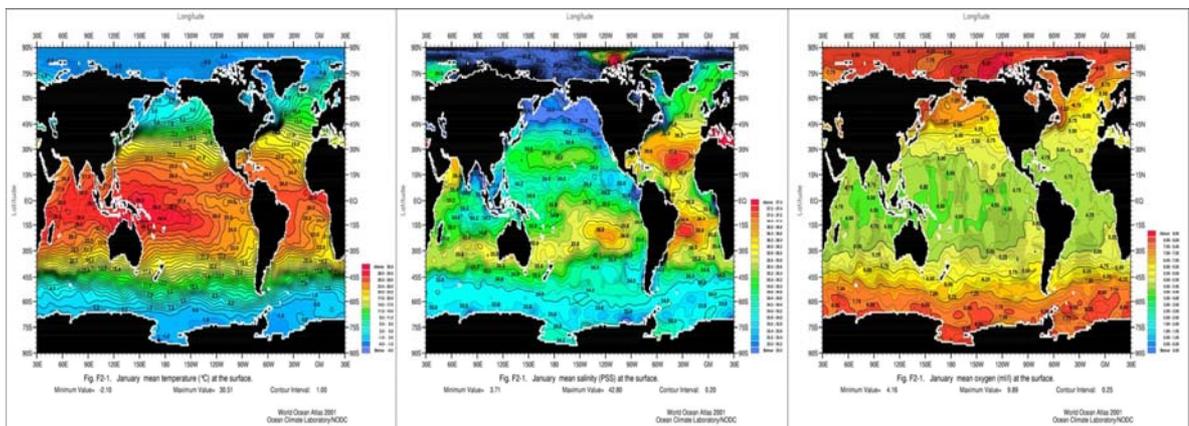


Figura 3.9 - Dados de temperatura, salinidade e oxigénio dissolvido da base de dados WOA01 (extraído de NOAA (2003a))

3.1.2.3. QuickScat

O satélite *QuickScat* é responsável pelo transporte do instrumento *SeaWinds*, um radar de micro-ondas especializado na medida e registo da velocidade e direcção do vento perto da superfície oceânica. Ele foi lançado com o objectivo de preencher a falta de dados de um outro satélite, o *NASA Scatterometer (NSCAT)*, quando este esteve a orbitar com perda de energia em 1997.

O *SeaWinds* utiliza uma antena de disco giratório com dois feixes pontuais que alternam num movimento circular (JPL, 2004b). A antena irradia pulsos de microondas a uma frequência de 13.4 GHz. O instrumento recolhe dados sobre oceano, terra e gelo numa banda contínua de 1800 km, fazendo aproximadamente 400000 medições e cobrindo 90% da superfície terrestre num dia (**Figura 3.10**). A resolução de leitura de um vector é de 25 km.

Os dados produzidos estão disponíveis no sistema em formato de armazenamento de dados científicos *HDF*. Os dados podem ser obtidos em <http://podaac.jpl.nasa.gov>.

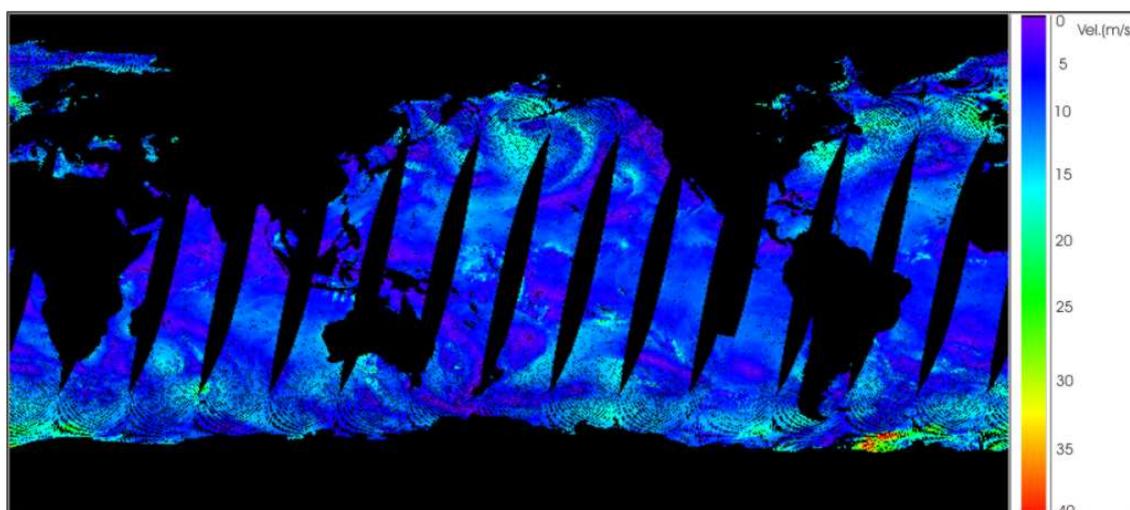


Figura 3.10 - Dados de intensidade do vento registados a 3 de Novembro de 2002 pelo QuickScat

3.1.2.4. SR95

O SR95 (JPL, 1996) é um modelo de previsão de marés que utiliza uma série de funções periódicas para o cálculo da altura da superfície oceânica em determinado

tempo e local. Este modelo utiliza uma série de componentes harmónicas capazes de descrever com precisão os fenómenos responsáveis pela variação da maré.

O conjunto de dados relativos a estas componentes harmónicas, foram obtidas com o auxílio de diversas medições em terra e via satélite dos fenómenos de variação das alturas de maré (como por exemplo as medições do satélite TOPEX/Poseidon seguidamente apresentado).

Os dados relativos às componentes harmónicas encontram-se em formato binário, e são processados pelo modelo SR95 que está implementado na ferramenta de processamento de dados desenvolvida.

3.1.2.5. TOPEX/Poseidon e Jason-1

Lançado em 1992, o satélite TOPEX/Poseidon é o resultado de uma parceria entre o CNES (*Centre Nationale d'Etudes Spatiales*) e a NASA (*North American Space Agency*) com o objectivo de mapear a topografia da superfície oceânica. Durante dez anos este satélite recolheu dados relativos a nível do mar com uma precisão de 5 cm, e outros parâmetros relacionados com a circulação oceânica que permitiram estudar os fenómenos envolvidos nestes processos e validar modelos de circulação oceânica.

O satélite Jason-1, lançado em 2001 é o responsável pelo seguimento da missão TOPEX/Poseidon, e responsável pela continuação da aquisição de dados sobre topografia da superfície oceânica.

Desta forma esta base de dados permite obter informação relativa à variação da agitação marítima e altura de onda. A **Figura 3.11** mostra o esquema utilizado para medição da altura significativa de onda. Esta informação é utilizada para definir os processos de mistura na camada superficial oceânica.

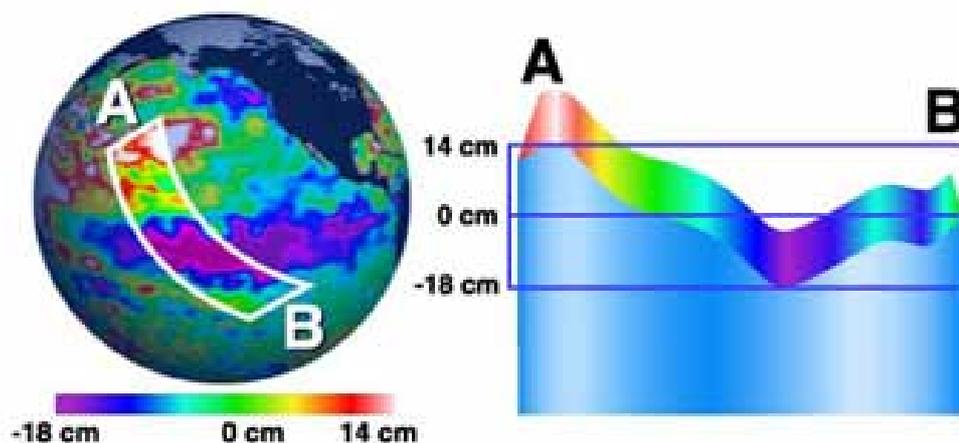


Figura 3.11 - Medição da altura de onda na superfície oceânica (extraído de JPL, 2004a)

Os dados estão disponíveis em formato ASCII, e podem ser processados por um programa especificamente desenvolvido para o efeito. Juntamente com os dados é fornecido o código deste programa criado em linguagem C (JPL, 2004a).

3.1.3. Dados dos derrames

3.1.3.1. Informações dos acidentes

Para uma correcta descrição das condições e parâmetros necessários para a modelação dos derrames petrolíferos, é necessário ter-se a informação pormenorizada de todos os acontecimentos relevantes do derrame, como por exemplo, datas, localizações, material derramado, etc.

Estas informações podem ser fornecidas muitas vezes pelas autoridades e organismos competentes. Estes dados são por vezes fornecidos *on-line*, ou podem ser obtido através de contacto directo com estes organismos.

A *Historical Incidents Search Page* (HAZMAT, 2004) é uma base de dados relativa a derrames acidentais de produtos petrolíferos e outros químicos. Contém relatórios e imagens de cerca de 1000 incidentes ocorridos entre 1977 e 2001. Esta base de dados é mantida pela agência americana NOAA e contém os acidentes mais importantes em que esta esteve envolvida.

3.1.3.2. Dados dos produtos derramados

As informações sobre as características dos produtos derramados são de extrema importância para a previsão do seu comportamento no ambiente e avaliação dos seus impactos. Tanto os modelos de transporte como os de envelhecimento necessitam de um conjunto de dados relativos às características físico-químicas desses produtos.

Assim, procurou-se reunir um conjunto de dados relativos às características físico-químicas de produtos petrolíferos que os caracterizem da melhor forma. Bobra e Callaghan (1990) compilaram num catálogo, um conjunto de informações sobre características físico-químicas de produtos. Neste catálogo estão descritas diversas características (massas volúmicas, viscosidades, tensões interfaciais, dados de evaporação, composição química, toxicidade, dispersibilidade, etc.) de quase duas centenas de produtos petrolíferos, compilados de diversas fontes. O **Quadro 3.1** apresenta as características descritas nesta base de dados.

Quadro 3.1 - Características compiladas por Bobra e Callaghan (1990)

| Características descritas no catálogo |
|--|
| Tipo |
| Gravidade API (American Petroleum Institute) |
| Massa Volúmica |
| Viscosidade |
| Tensões interfaciais |
| Ponto de escorrimento |
| Ponto de ignição |
| Pressão de vapor |
| Dados de destilação |
| Formação de emulsões, tendencia e estabilidade |
| Envelhecimento (Weathering) |
| Dispersibilidade |
| Hidrocarbonetos |
| Teor de ceras |
| Solubilidade aquosa |
| Toxicidade |
| Enxofre |
| Outros |

Outros estudos são descritivos de características específicas de vários produtos petrolíferos. Chau e Mackay (1988) realizaram um estudo descritivo da dispersibilidade e a influência do envelhecimento e das condições de mistura. Clark *et al* (1986) descrevem os factores que influenciam as perdas por dispersão vertical de pequenas gotas de óleo na coluna de água. Bobra (1992a) apresenta um estudo da evaporação de

diferentes produtos petrolíferos. Bobra (1992b) apresenta um estudo da influência da emulsificação na solubilidade dos produtos petrolíferos derramados. Fingas (1999) e Bobra (1991) apresentam estudos relativos aos processos de emulsificação.

Outro estudo, de Wang *et al* (2003), descreve as características físico-químicas de cerca de uma dezena dos produtos petrolíferos mais utilizados. Tal como a compilação inicialmente referida, esta tem como objectivo a caracterização dos principais produtos petrolíferos susceptíveis de serem derramados acidentalmente no meio marinho.

3.2. Ferramentas de modelação

Estas ferramentas consistem num conjunto de *software* de modelação matemática que procura reproduzir os principais processos que têm lugar após a ocorrência de derrames de produtos petrolíferos.

Estes estão divididos em três grupos: As ferramentas de modelação de hidrodinâmica, ferramentas de modelação de transporte de massa e ferramentas de modelação dos processos de degradação de produtos petrolíferos.

3.2.1. Modelos Hidrodinâmicos

3.2.1.1. RMA2

O programa RMA2 é um modelo hidrodinâmico bidimensional no plano horizontal baseado num método de elementos finitos desenvolvido pelo *US Army Corps of Engineers*. Com este *software* é possível calcular a elevação da superfície da água e as componentes horizontais de velocidade média para um escoamento subcrítico com superfície livre.

O efeito do atrito no fundo é calculado através das formulações de Manning ou Chezy e as características de turbulência são definidas a partir de coeficientes de viscosidade turbulenta (WES-HL, 1996). Este permite a análise de regimes de escoamento permanentes e varáveis.

Este modelo tem sido utilizado para caracterizar escoamentos na envolvente de ilhas, pontes, obstáculos, rios, reservatórios e estuários. O pré e pós-processamento de dados do programa RMA2 é realizado pelo programa SMS (*Surface-Water Modeling System*) (EMS, 2004)

3.2.1.2. POM

O *Princeton Ocean Model* (POM), é um modelo hidrodinâmico tridimensional, desenvolvido para a modelação de estuários e zonas costeiras (Mellor, 1998).

O programa resolve uma versão simplificada das equações de Reynolds utilizando coordenadas sigma na direcção vertical e coordenadas ortogonais curvilíneas na direcção horizontal. As simplificações aparecem na definição dos gradientes de pressão e nos termos relativos à difusão horizontal.

O modelo utiliza um esquema numérico de diferenças finitas para a resolução destas equações. Os dados iniciais são inseridos numa ferramenta de pré-processamento desenvolvida no Laboratório de Hidráulica e Recursos Hídricos do Departamento de Engenharia Civil da Universidade do Minho. Os resultados do modelo podem ser visualizados no programa SMS, com a limitação de visualização de planos bidimensionais por camadas.

O facto de se poder utilizar os resultados da hidrodinâmica da camada superficial para a modelação do transporte de produtos petrolíferos derramados constitui uma mais valia deste modelo para os derrames de produtos petrolíferos.

Encontra-se em desenvolvimento uma ferramenta de visualização tridimensional para uma melhor análise e interpretação dos resultados do modelo.

3.2.2. Modelos de Transporte

3.2.2.1. RMA4

O programa RMA4 é um modelo bidimensional no plano horizontal de transporte de massa para estudos de problemas de qualidade da água baseado num método de elementos finitos. Este programa foi desenvolvido pelo *US Army Corps of*

Engineers (WES-HL, 2000). Permite calcular a concentração de, no máximo, 6 constituintes, quer sejam conservativos ou não conservativos, numa malha de elementos unidimensional ou bidimensional. Trata-se de um modelo Euleriano, que resolve numericamente as equações de conservação de massa para cada um dos constituintes considerado.

O RMA4 está preparado para simular os processos de advecção e difusão, considerando uma distribuição vertical uniforme num ambiente aquático. O modelo pode ser utilizado para a avaliação de qualquer substância conservativa que esteja dissolvida em água ou que se possa assumir que a força de impulsão exercida sobre a substância na coluna de água é nula (WES-HL, 2000). Mais adiante será apresentada uma solução que permitirá a utilização deste modelo para simular situações de derrames de produtos petrolíferos, uma vez que esta situação não se enquadra nos pressupostos descritos anteriormente.

Para a maioria das aplicações este modelo utiliza as soluções hidrodinâmicas calculadas pelo programa RMA2.

3.2.2.2. GNOME

O GNOME (*General NOAA Oil Modeling Environment*) é um modelo lagrangeano de previsão da trajectória de derrames de produtos petrolíferos, desenvolvido pela NOAA (*National Oceanographic and Atmospheric Administration*) (NOAA, 2004). A trajectória de produtos derramados é estimada através de informações fornecidas sobre condições de vento, regimes de circulação, escoamento e tipo de produto derramado.

Utiliza ainda um coeficiente de dispersão para simular os processos de dispersão turbulenta. O programa calcula a trajectória de um determinado número de partículas e o afastamento entre estas de forma a simular o processo dispersivo.

Este modelo permite ainda o cálculo de incertezas associadas à observação e previsão de correntes e ventos. Utiliza ainda algoritmos simples para simular o envelhecimento e consequente diminuição da concentração no meio.

3.2.3. Modelos de Degradação

3.2.3.1. ADIOS2

O ADIOS2 (*Automated Data Inquiry for Oil Spills*) é mais um *software* de modelação desenvolvido pela NOAA. O programa inclui uma biblioteca de cerca de mil tipos de produtos com as respectivas características físico-químicas, e simula os principais processos de degradação no ambiente marinho. Simula a evolução das características de massa volúmica, viscosidade, fracção de água incorporada, fracção evaporada, fracção dispersa e perda de benzeno, entre outras. Permite ainda considerar o efeito de acções de queima e remoção física dos produtos derramados. Este modelo apresenta os valores calculados ao longo do tempo bem como as incertezas associadas aos parâmetros utilizados no modelo.

Tem em conta os efeitos do vento, temperatura da água, salinidade e agitação marinha no cálculo da degradação do produto derramado. Os algoritmos utilizados baseiam-se essencialmente nos algoritmos associados aos processos de degradação descritos no capítulo 2. Uma descrição mais detalhada dos algoritmos pode ser encontrada no próprio *software*, que pode ser obtido em NOAA (2003c).

3.2.3.2. OIOLDEGRAD e BIODERGRAD

Os modelos OIOLDEGRAD e BIODERGRAD consistem na implementação em linguagem FORTRAN dos processos de degradação físico-química e biológica dos produtos petrolíferos derramados, apresentados no capítulo 2. Ambos foram desenvolvidos no Laboratório de Hidráulica e Recursos Hídricos do Departamento de Engenharia Civil da Universidade do Minho, tendo o modelo BIODERGRAD sido desenvolvido em colaboração com o departamento de Engenharia Biológica desta mesma Universidade (Gomes *et al*, 2003b).

A implementação e funcionalidades destes modelos são descritas no capítulo 4 juntamente com alguns exemplos.

3.3. Sistema de Informação Geográfica

O Sistema de Informação Geográfica (SIG) integra informação georeferenciada com informação alfanumérica, conferindo atributos (informação) a elementos geográficos (Matos, 2001).

Esta ferramenta é utilizada para diversos fins, nomeadamente em planeamento urbanístico, gestão de recursos hídricos, estudos ambientais, ordenamento do território, etc. A integração de elementos geográficos com informação alfanumérica permite quantificar características, analisá-las e processá-las de uma forma visualmente compreensível. O programa de SIG utilizado no SIMDHAM é o *software ArcView* (ESRI, 1996).

3.4. Processamento de dados

A necessidade de transformação das bases de dados adquiridas em diferentes formatos informáticos e uma selecção mais restrita destes mesmos dados para serem utilizados nos modelos a criar leva à necessidade de se utilizarem ferramentas de processamento de dados para estas tarefas.

3.4.1. Ferramenta de pré e pós processamento de dados (SMS)

O SMS (*Surface Water Modeling System*), é uma ferramenta de pré e pós processamento dos programas RMA2 e RMA4. Esta interface, permite definir as condições iniciais das simulações, criar os ficheiros de dados e as malhas de elementos finitos. Possui uma ferramenta que permite efectuar a transformação de coordenadas entre diferentes sistemas e permite visualizar resultados calculados (**Figura 3.12**).

Para além dos resultados dos modelos RMA2 e RMA4, este programa permite visualizar os resultados do modelo tridimensional POM. A visualização é feita por planos horizontais bidimensionais.

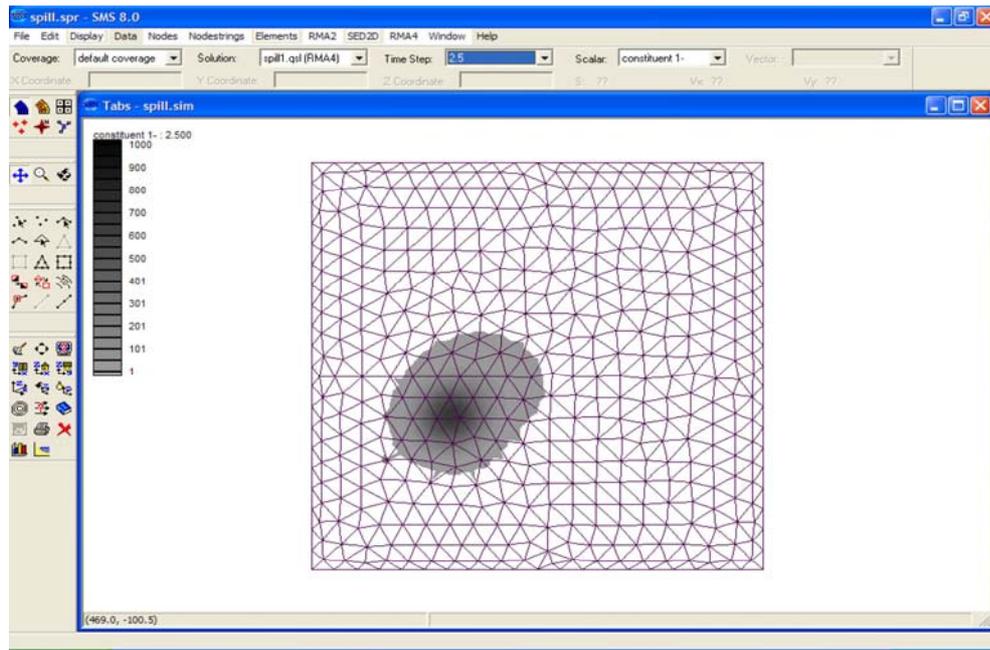


Figura 3.12 - Surface Water Modeling System – malha de elementos e resultados de uma simulação

3.4.2. Ferramenta de processamento do LHRH

Para processamento de dados foi desenvolvida no Laboratório de Hidráulica e Recursos Hídricos (LHRH) uma ferramenta, cujas principais características são as seguintes: adquirir dados seleccionados das bases de dados ETOPO2 e GSHHS (**Figura 3.13**); geração de malhas de elementos finitos triangulares definindo a área máxima e o ângulo interior mínimo (**Figura 3.14**); a criação de dados relativos ao regime de maré em determinado ponto através do o modelo *SR95*, o qual calcula a variação da altura de maré ao longo do tempo, podendo ser estes dados exportados posteriormente para uma folha de cálculo (**Figura 3.15**).

Os dados são seleccionados definindo a área geográfica e podem ainda ser convertidos em coordenadas *UTM (Universal Transverse Mercator)* e em formato *DXF (Drawing Interchange Format)*. As malhas de elementos finitos são geradas com o auxílio do software *Triangle*, um software em código C, implementado na ferramenta de processamento.

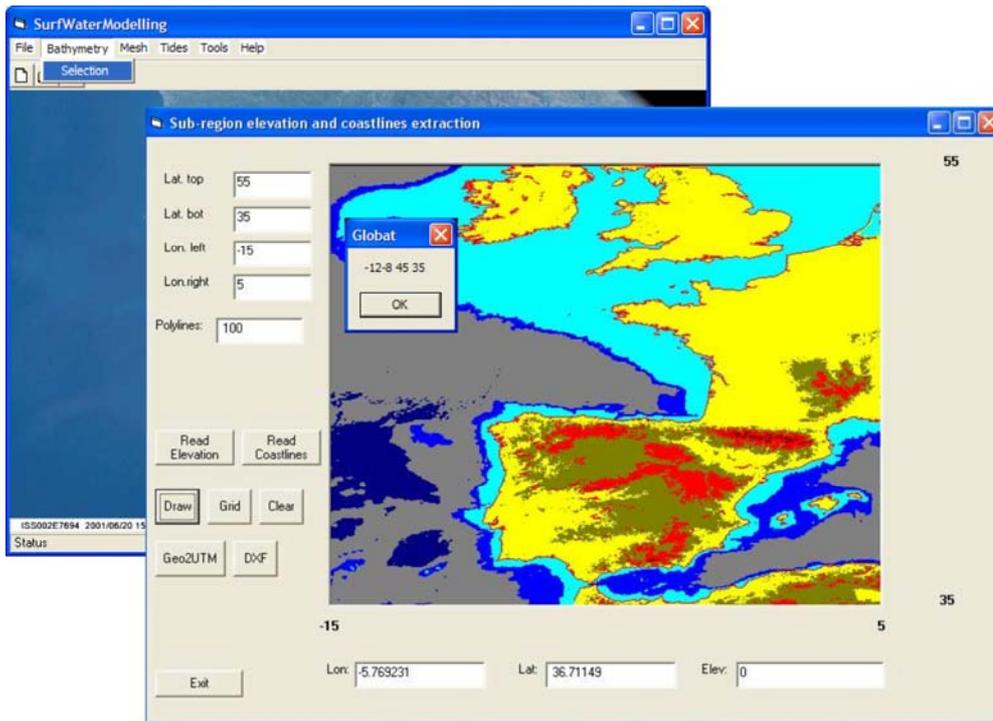


Figura 3.13 - Selecção de batimetria e linhas de costa na ferramenta de processamento

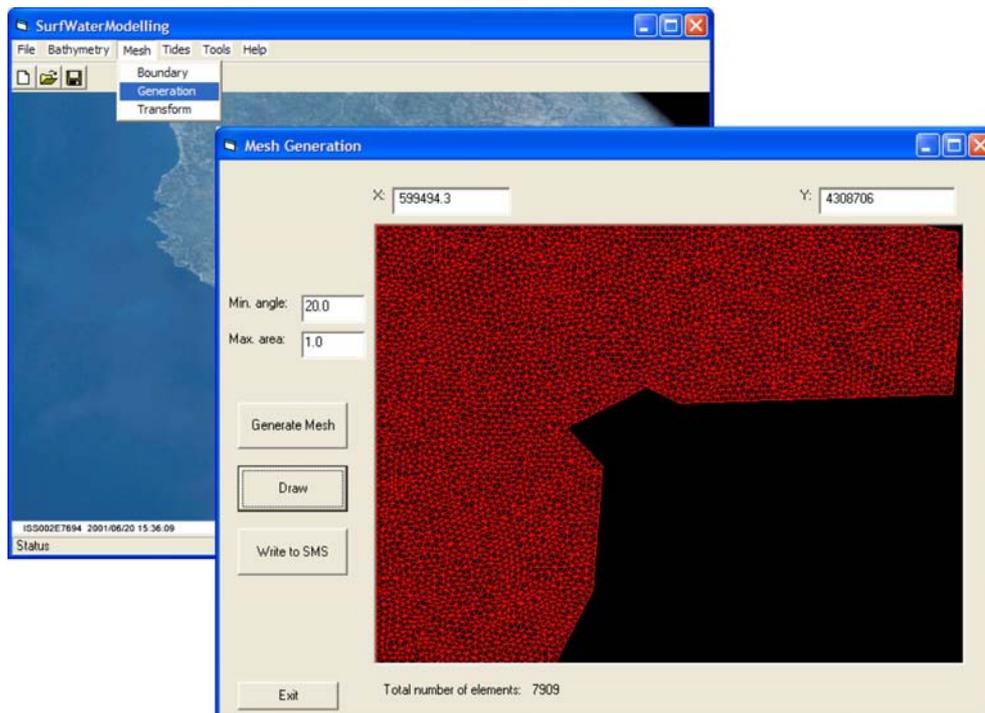


Figura 3.14 - Geração de malhas de elementos finitos triangulares

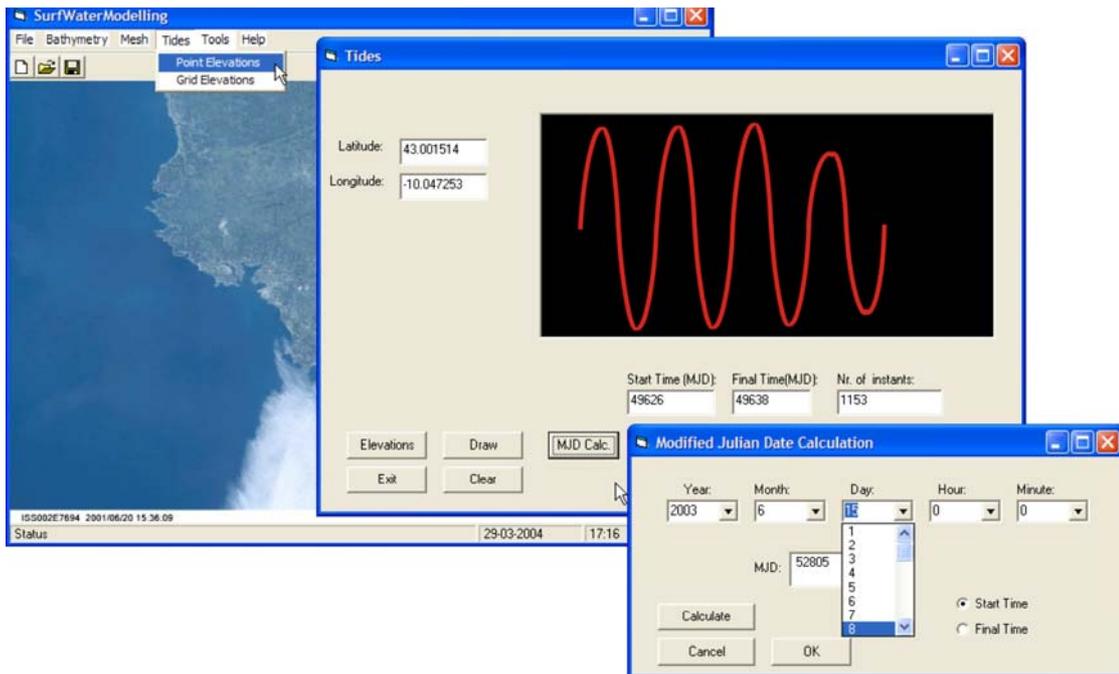


Figura 3.15 - Variação da altura de maré

3.4.3. Ferramentas de leitura de ficheiros NetCDF e HDF

Alguns dados utilizados, apresentam-se em formatos específicos de armazenamento, tais como o *NetCDF* e o *HDF*. Para a leitura desta informação é necessário utilizar programas específicos com capacidade de leitura destes dados.

No SIMDHAM foram utilizadas duas ferramentas de acesso livre, o *ncBrowse* (**Figura 3.16**) para os ficheiros em *NetCDF*, e o *HDFview* (**Figura 3.17**) para os ficheiros *HDF*. Estes programas são escritos em linguagem de programação *Java*, linguagem que permite serem utilizados em qualquer sistema operativo.

Existem outras ferramentas de leitura deste tipo de ficheiros que podem ser personalizadas, pois estão disponíveis em código aberto em linguagem FORTRAN. Os códigos de programação podem ser obtidos livremente e podem ser modificados para satisfazer necessidades específicas.

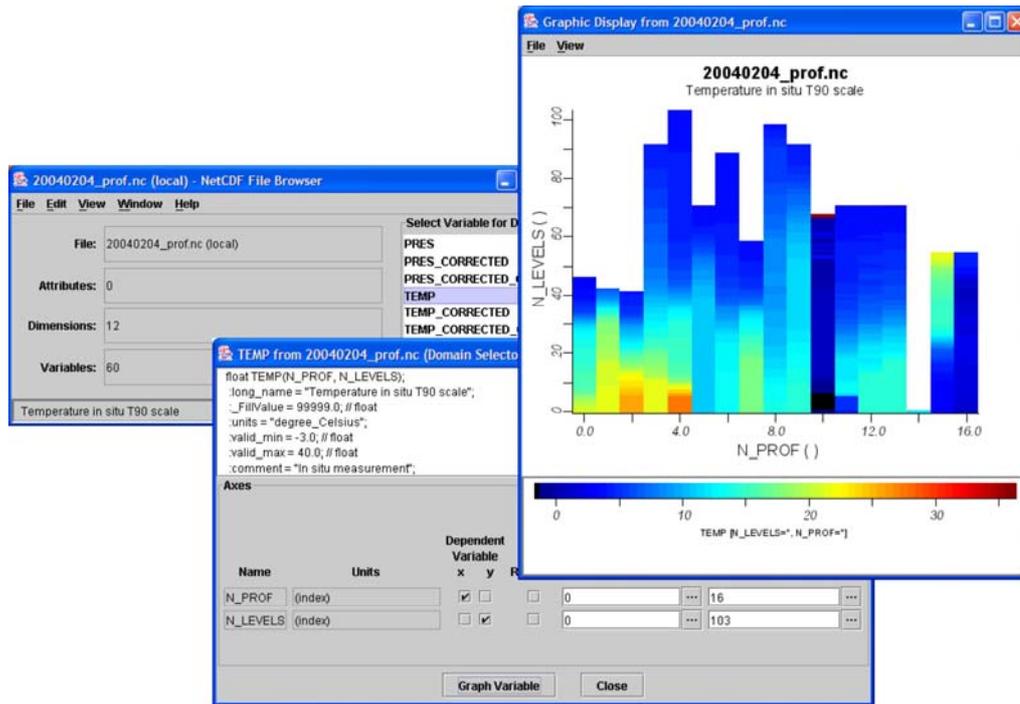


Figura 3.16 - ncBrowse para leitura de ficheiros NetCDF

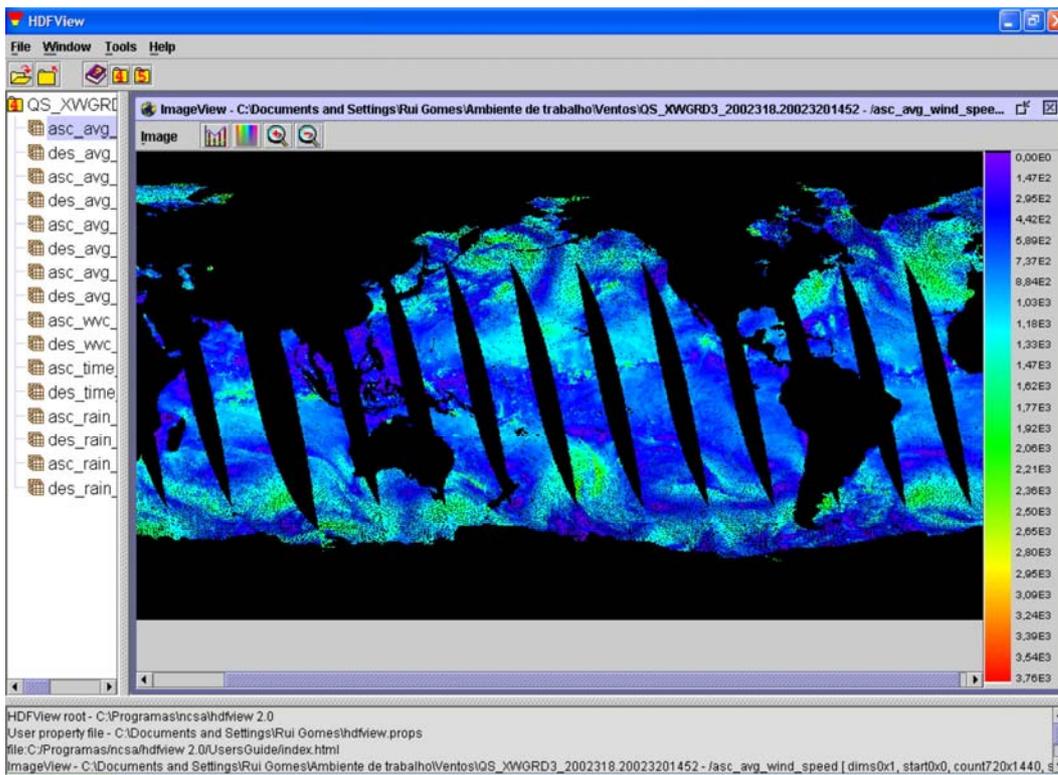


Figura 3.17 - HDFview para leitura de ficheiros HDF

3.5. Fluxo de informação interna

De forma a organizar a informação de base do sistema, a informação criada pelas ferramentas de processamento, pelos modelos matemáticos, pelo sistema de informação geográfica e a sua integração em todo sistema, foi definido um fluxograma de dados no sistema. A **Figura 3.18** apresenta um fluxograma geral de dados do SIMDHAM.

Pretende-se portanto integrar as componentes descritas anteriormente no sistema de informação e definir assim o funcionamento deste.

Para os seus módulos principais, torna-se necessário realizar uma análise mais detalhada para simplificar a estrutura complexa do fluxo de informação. Desta forma analisou-se o fluxo de informação para as seguintes componentes: Bases de dados e modelos matemáticos e para o SIG.

3.5.1. Fluxo de informação para das bases de dados

Os dados adquiridos, necessitam de ser processados, de forma a estarem em formatação adequada à sua utilização nas diversas ferramentas de modelação. Assim, antes de serem utilizados nos respectivos modelos, estes dados, necessitam de ser processados pelas ferramentas desenvolvidas.

O esquema da **Figura 3.19** mostra o fluxo de bases de dados utilizados no SIMDHAM.

Desta forma, toda a informação de base possui um formato próprio tal como descrito anteriormente neste capítulo. Assim, o papel das ferramentas de processamento consiste em ler e transformar esta informação em informação de base utilizável pelos diversos modelos.

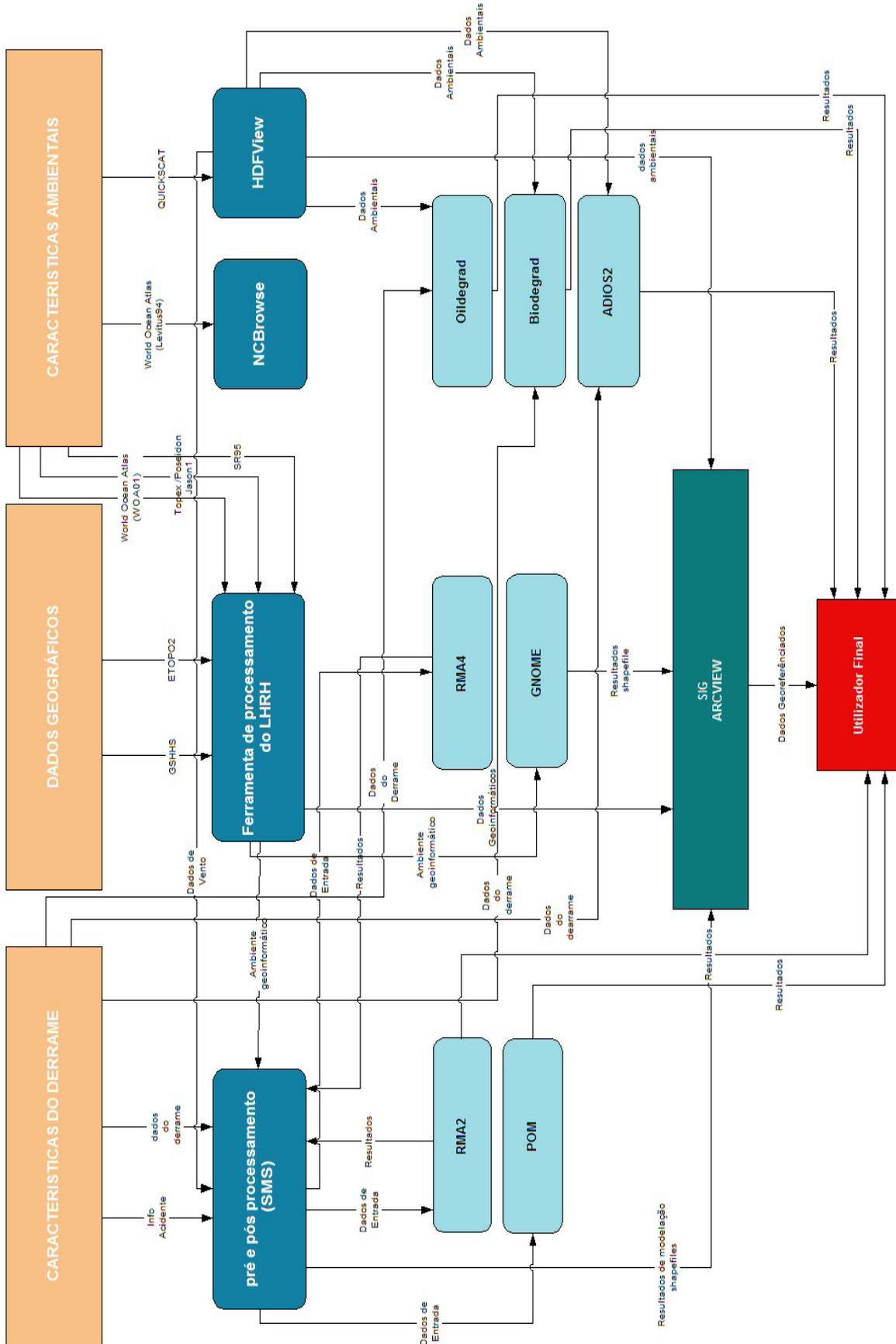


Figura 3.18 - Fluxograma geral de informação no SIMDHAM

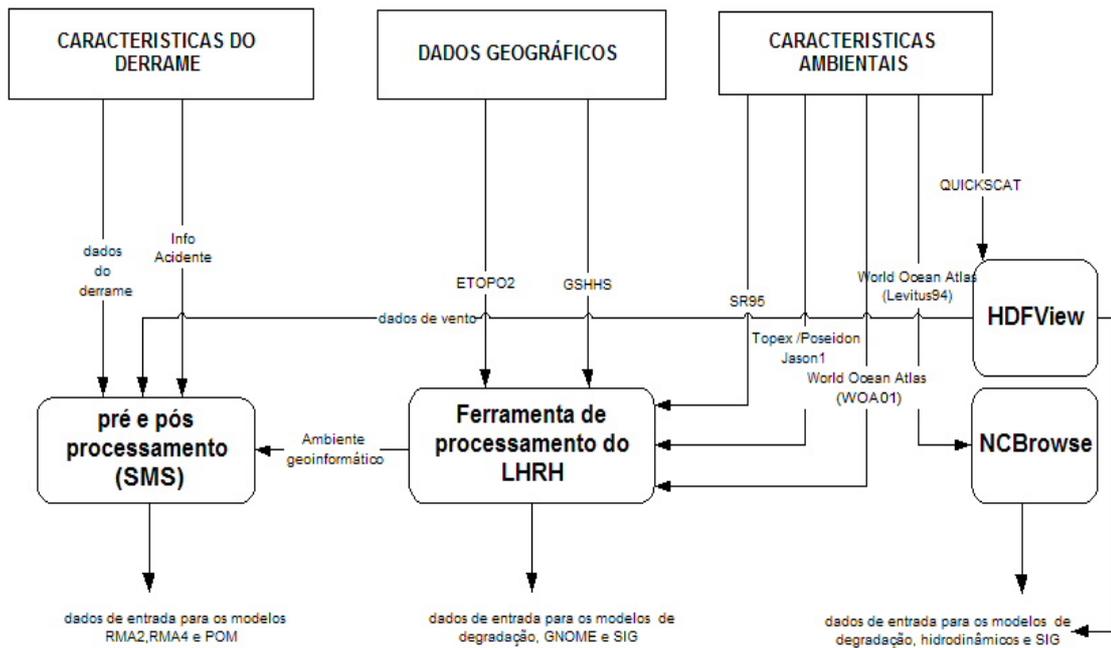


Figura 3.19 - Fluxo de bases de dados

Os dados geográficos, as características do derrame e as características ambientais, são processados pelas diversas ferramentas e transformados para formatos que possam ser directamente inseridos nos modelos de simulação. Os dados geográficos podem ser lidos pela ferramenta de processamento do LHRH desenvolvida de forma a poder ser utilizada nos modelos. As características do derrame são introduzidas nas ferramentas de pré-processamento dos modelos de transporte. As características ambientais são processadas pelas diferentes ferramentas existentes, consoante os formatos em que se encontram. Existem no entanto, ferramentas que apenas conseguem ler as informações de base, não possibilitando a sua transformação directa para utilização nos modelos. Nestes casos os dados podem ser lidos com as ferramentas de processamento, mas têm que ser manualmente inseridos nos modelos. É o caso dos programas *HDFView* e *NCBrowse*.

Futuramente poderão ser desenvolvidas de raiz ferramentas que possibilitem essa transformação.

3.5.2. Fluxo de informação nos modelos matemáticos

Os modelos matemáticos necessitam de dados em formato específico relativos a características ambientais, dados do derrame e dados geográficos. Estes dados, após o

processamento inicial podem ser utilizados por cada modelo como dados de entrada. O fluxo de dados é apresentado na **Figura 3.20**.

Os dados provenientes das ferramentas de processamento são assim inseridos nos respectivos modelos de forma automática (através de um ficheiro transformado) ou manual.

Os modelos hidrodinâmicos utilizam essencialmente dados geográficos para calcular o movimento de massas de água; os modelos de transporte utilizam essencialmente dados relativos aos acidentes, ao material derramado e os resultados dos modelos hidrodinâmicos; e os modelos de degradação utilizam dados ambientais e das características físico-químicas do material derramado.

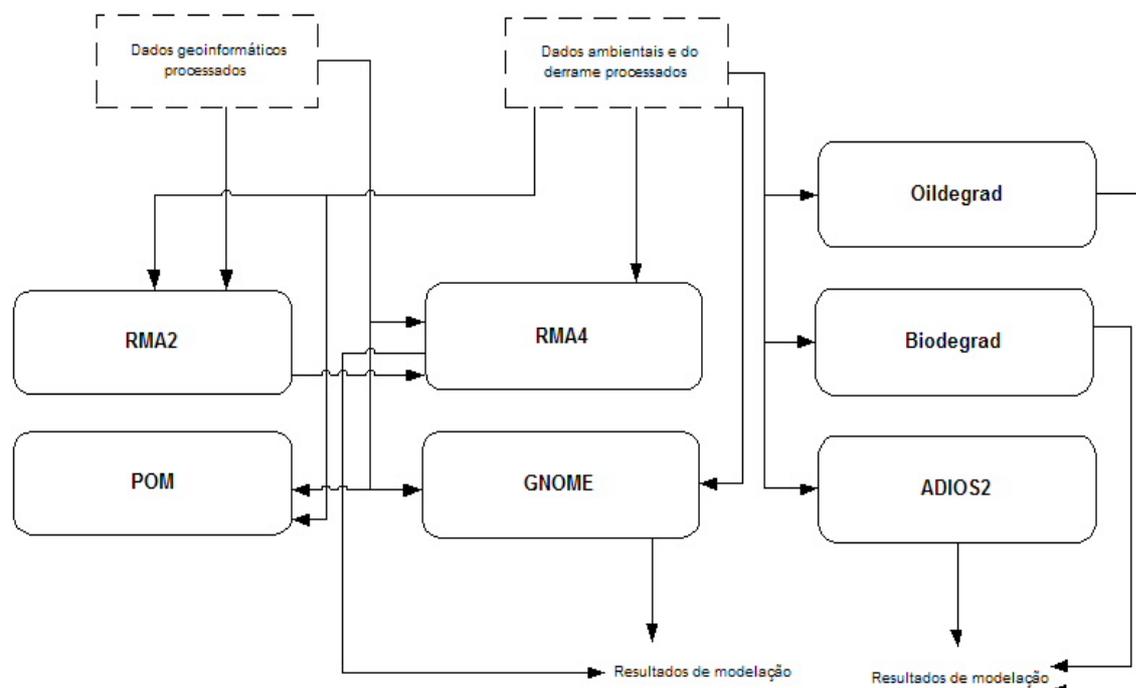


Figura 3.20 - Fluxo de dados para os modelos matemáticos

3.5.3. Fluxo de informação para o SIG e para o utilizador final

Obtidos os resultados de modelação, estes podem ser observados de diversas formas. Algumas ferramentas de processamento permitem uma análise directa dos resultados obtidos (por exemplo o *SMS*), ou podem ser inseridos num SIG que permita gerir as informações criadas mais relevantes. A **Figura 3.21** apresenta o fluxo de dados no SIG e para o utilizador final.

Assim, através de ferramentas que proporcionem a visualização de várias informações e resultados provenientes dos modelos num mesmo ambiente informático (podendo ser no SIG ou em outros, por exemplo SMS), o utilizador final pode realizar uma melhor gestão de toda a informação disponibilizada.

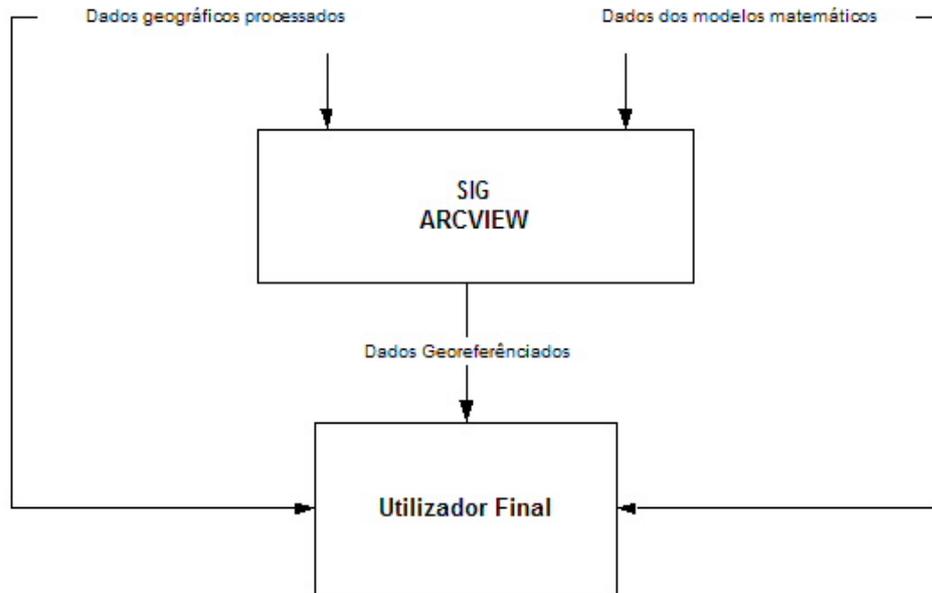


Figura 3.21 - Fluxo de dados no SIG e utilizador final

4. ASPECTOS PARTICULARES DE COMPONENTES DO SIMDHAM

4.1. Avaliação do desempenho dos modelos de transporte

Com o objectivo de avaliar o desempenho dos modelos de transporte na simulação da evolução dos produtos petrolíferos derramados procedeu-se a um conjunto de simulações em que se consideram diferentes valores dos parâmetros envolvidos nas referidas simulações. Para tal, analisaram-se as vantagens, desvantagens e limitações do modelo euleriano (RMA4) e do modelo lagrangeano (GNOME).

A análise de desempenho do modelo euleriano RMA4 na simulação de situações de derrames de produtos petrolíferos foi realizada a partir dos resultados obtidos em diferentes cenários de simulação. Nestes cenários considerou-se a variação de diversos parâmetros de forma a analisar a adequação dos modelos a estas variações. Foi realizada a mesma análise para o modelo lagrangeano GNOME. Os dados e características utilizadas nas simulações efectuadas com o modelo euleriano (RMA4) e o lagrangeano (GNOME) estão descritas no **Quadro 4.1**.

Desta forma, procurou-se analisar diversas variantes dos modelos de transporte. Para cada tipo de modelo (Euleriano e Lagrangeano) foram realizadas simulações em diferentes escalas de derrame, considerando áreas de 1 e 1000 km^2 . Para cada uma destas escalas foram ainda consideradas diferentes resoluções das malhas de elementos finitos do modelo euleriano, e tipos de emissão (pontual e contínua) para ambos os modelos. Analisou-se ainda o efeito da variação dos coeficientes de difusão e dos

intervalos de tempo de cálculo para cada simulação, e a provável estabilidade segundo o n° de Courant (definido adiante) para o modelo euleriano.

Quadro 4.1 – Dados utilizados e características das simulações realizadas

| Simulação | Tipo de modelo | Área de simulação (km ²) | Nº de Elementos | Tipo de emissão | Coefficiente de difusão (m ² /s) | Tempo de simulação (h) | Intervalo de tempo (h) | nº de Courant (τ) |
|--------------|----------------|--------------------------------------|-----------------|-----------------|---|------------------------|------------------------|--------------------------|
| Simulação 1 | Euleriano | 1 | 878 | Pontual | 0.1 | 2 | 0.08 | 0.8533747 |
| Simulação 2 | Euleriano | 1 | 878 | Pontual | 1 | 2 | 0.08 | 0.8533747 |
| Simulação 3 | Euleriano | 1 | 878 | Pontual | 1 | 2 | 0.05 | 0.5333592 |
| Simulação 4 | Euleriano | 1 | 3358 | Pontual | 0.1 | 2 | 0.08 | 1.6689097 |
| Simulação 5 | Euleriano | 1 | 3358 | Pontual | 1 | 2 | 0.08 | 1.6689097 |
| Simulação 6 | Euleriano | 1 | 3358 | Contínua | 0.1 | 2 | 0.08 | 1.6689097 |
| Simulação 7 | Euleriano | 1 | 3358 | Contínua | 1 | 2 | 0.08 | 1.6689097 |
| Simulação 8 | Euleriano | 10000 | 9244 | Pontual | 50 | 12 | 0.5 | 1.730623 |
| Simulação 9 | Euleriano | 10000 | 9244 | Pontual | 250 | 12 | 0.5 | 1.730623 |
| Simulação 10 | Euleriano | 10000 | 9244 | Contínua | 50 | 12 | 0.5 | 1.730623 |
| Simulação 11 | Euleriano | 10000 | 9244 | Contínua | 250 | 12 | 0.5 | 1.730623 |
| Simulação 12 | Euleriano | 10000 | 9244 | Pontual | 250 | 12 | 0.5 | 1.730623 |
| Simulação 13 | Lagrangeano | 1 | --- | Pontual | 0.1 | 2 | 0.08 | --- |
| Simulação 14 | Lagrangeano | 1 | --- | Pontual | 1 | 2 | 0.08 | --- |
| Simulação 15 | Lagrangeano | 1 | --- | Pontual | 1 | 2 | 0.05 | --- |
| Simulação 16 | Lagrangeano | 1 | --- | Contínua | 0.1 | 2 | 0.08 | --- |
| Simulação 17 | Lagrangeano | 1 | --- | Contínua | 1 | 2 | 0.08 | --- |
| Simulação 18 | Lagrangeano | 10000 | --- | Pontual | 50 | 12 | 0.5 | --- |
| Simulação 19 | Lagrangeano | 10000 | --- | Pontual | 250 | 12 | 0.5 | --- |
| Simulação 20 | Lagrangeano | 10000 | --- | Contínua | 50 | 12 | 0.5 | --- |
| Simulação 21 | Lagrangeano | 10000 | --- | Contínua | 250 | 12 | 0.5 | --- |
| Simulação 22 | Lagrangeano | 10000 | --- | Pontual | 250 | 12 | 0.5 | --- |
| Simulação 23 | Lagrangeano | 10000 | --- | Contínua | 10000 | 12 | 0.5 | --- |

4.1.1. Avaliação do desempenho do modelo Euleriano

4.1.1.1. Problemas de estabilidade e erro numérico associado

Tal como referido anteriormente, os modelos eulerianos descrevem a distribuição espacial e temporal da concentração de um poluente.

Os modelos computacionais existentes usam métodos numéricos para a resolução da equação diferencial parcial de conservação de massa (equação 2.11). Em determinadas condições, aos métodos numéricos utilizados para a resolução deste tipo de equações estão associados alguns erros em relação à solução analítica (Chapra, 1997). Um destes erros é uma ampliação, induzida pelo método, da dispersão física de determinado poluente em meio líquido. Esta ampliação é chamada *dispersão numérica*.

Assim, a dispersão real (E_p) de um poluente, é dada por:

$$E_p = E_m + E_n \quad (4.1)$$

Onde $E_m (m^2 s^{-1})$ é o valor de dispersão introduzido pelo utilizador no modelo e $E_n (m^2 s^{-1})$ é o valor da dispersão numérica.

A dispersão numérica é influenciada por factores tais como a discretização espacial e a discretização temporal. Chapra (1997), propõe para soluções numéricas variáveis no tempo, utilizando um esquema numérico de volumes de controlo, que a dispersão numérica possa ser dada por:

$$E_n = \frac{U\Delta x}{2} - \frac{U^2 \Delta t}{2} \quad (4.2)$$

Onde $U (m^2 s^{-1})$ é a velocidade média; $\Delta x (m)$ é o espaçamento considerado na discretização espacial; e $\Delta t (s)$ o intervalo de tempo adoptado na discretização temporal.

Os erros associados aos métodos numéricos podem ser diminuídos perante certas condições. A estabilidade, ou seja, o facto de os erros não serem ampliados pelo esquema numérico utilizado, pode ser alcançada seguindo essas condições. A **condição de Courant** denota exactamente isto e pode ser descrita por:

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{U} \quad (4.3)$$

Esta condição pode ser representada pelo **número de Courant**:

$$\gamma = \frac{U\Delta t}{\Delta x} \quad (4.4)$$

Quando $\gamma < 1$, significa que a condição de Courant é cumprida. Esta condição pode ser interpretada como uma imposição para o valor do intervalo de tempo de cálculo, que não poderá ultrapassar um determinado valor, de forma a que determinada partícula de água não se mova mais do que um segmento Δx , para uma dada velocidade U (Chapra, 1997).

Assim, pode concluir-se que um ponto crítico para alcançar um bom resultado numérico num modelo euleriano (entenda-se bom resultado como sendo uma solução com um baixo erro associado ao método numérico), consiste numa correcta definição do intervalo de tempo adoptado no cálculo, do valor de dispersão a ser inserido no modelo e da resolução da malha de elementos finitos (para o caso do modelo RMA4).

4.1.1.2. Definição do volume dos elementos e concentração no meio

Realizou-se então, uma análise da simulação de um derrame de hidrocarbonetos, utilizando o modelo computacional RMA4 para testar a sua adequação a esta situação.

Uma vez que este modelo é um 2DH (tal como descrito no capítulo 3), surge o problema de definição da dimensão da profundidade da malha de elementos finitos a ser utilizada. Se considerássemos que os elementos teriam a profundidade do fundo oceânico estaríamos a considerar, que haveria uma mistura homogénea do produto petrolífero derramado, no plano vertical, ao longo desta profundidade. Uma vez que, na realidade, devido a possuírem uma massa volúmica inferior à da água do mar, e serem pouco solúveis nesta, os produtos petrolíferos se mantêm à superfície não se dispersando em quantidades significativas em profundidade. Ter-se-á que adoptar uma estratégia adequada à simulação do problema em análise.

A estratégia estabelecida consiste em criar uma malha de elementos finitos com uma profundidade uniforme de 1 *m* (**Figura 2.1**). Desta forma, condiciona-se a dispersão vertical no modelo (considerada num modelo 2DH de transporte instantânea e dependente da profundidade local) à dispersão numa camada de profundidade constante. Na prática, a concentração na coluna de água passa a ser independente da profundidade local.

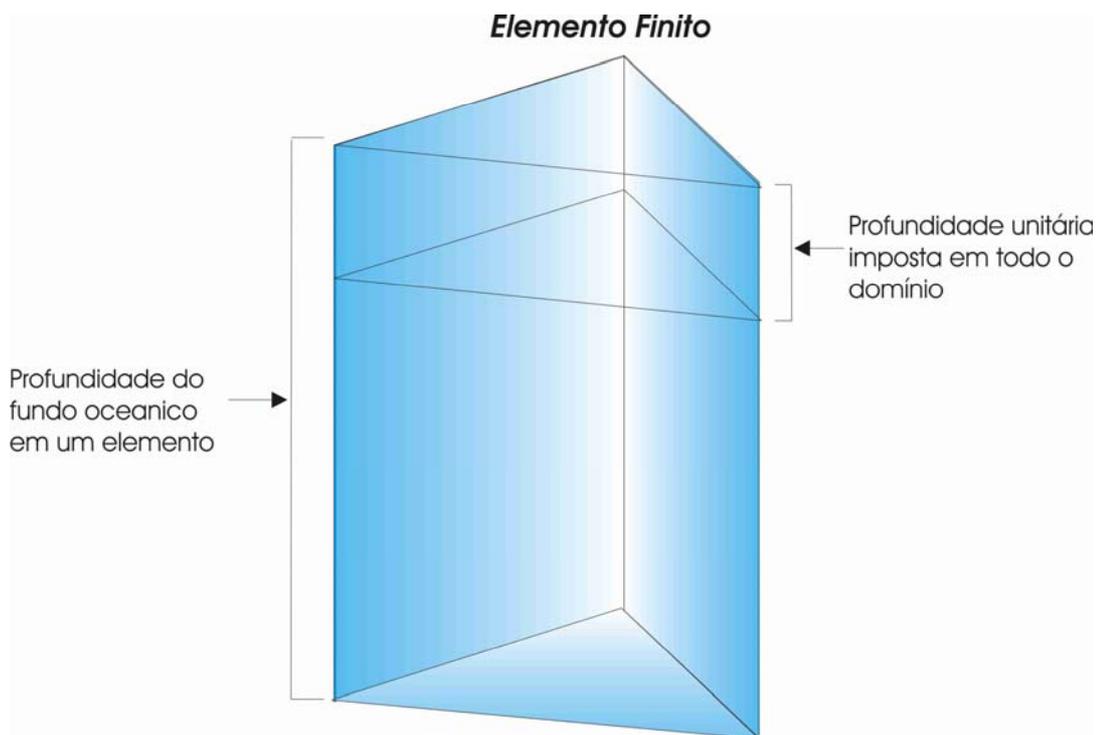


Figura 4.1 – Estabelecimento da profundidade dos elementos finitos

Neste modelo a concentração passa a estar relacionado com a espessura da mancha resultante do derrame. Na realidade o que se passa é que a maior parte dos componentes dos derrames petrolíferos são líquidos de fase não aquosa, ou seja não estão propriamente misturados na água, mas encontram-se espalhados à superfície da água. Nesta perspectiva não faria muito sentido falar-se em concentração do poluente na água, mas antes em quantidade de poluente distribuído no espaço. Este aspecto implica entender os coeficientes de dispersão como um coeficiente de “espalhamento”.

Assim, na generalidade dos casos, os coeficientes de dispersão a utilizar na simulação de derrames de produtos petrolíferos apresentam-se com valores inferiores aos que se utilizam na simulação de transporte de poluentes de fase aquosa.

No modelo euleriano utilizado, foi definida uma “concentração” mínima para estabelecer os limites da mancha “espalhada” (dispersa). Foi considerado o valor limite de $1 \text{ mg } l^{-1}$, considerando-se que valores de concentração inferiores a estes não serão considerados para efeitos de visualização dos resultados.

Em cada elemento da malha de elementos finitos a concentração calculada pode ser relacionada com a espessura da mancha. A massa de hidrocarbonetos derramados (kg) num elemento, é dada por:

$$m_o = C \times V_e \quad (4.5)$$

Onde C é a concentração calculada no modelo ($kg\ m^{-3}$); e V_e o volume do elemento (m^3). O volume correspondente de produto petrolífero derramado (m^3) é:

$$V_o = \frac{m_o}{\rho_o} \quad (4.6)$$

Onde ρ_o é a massa volúmica do produto derramado ($kg\ m^{-3}$). uma vez que a profundidade de cada elemento é unitária, a espessura da mancha, h_o , pode ser calculada por:

$$h_o = \frac{V_o}{A_e} \quad (4.7)$$

A_e é a área do elemento (m^2).

4.1.1.3. Simulações efectuadas

Segundo o *nº de Courant* apresentado para as simulações do modelo euleriano, as de maior área serão as que possuirão maior instabilidade numérica, muito devido a estas possuírem elementos de maior dimensão. Uma estratégia a ser utilizada seria adequar os intervalos de tempo de cálculo (Δt) a estes Δx , no entanto isto levaria a que os números de cálculos aumentassem muito, levando conseqüentemente a um elevado tempo total de cálculo. Assim preferiu-se aceitar algum erro numérico associado e procurar corrigi-lo com ajustes no coeficiente de difusão.

No primeiro cenário foi considerado um domínio com uma área de $1\ km^2$ ($1km\ X\ 1km$) discretizado por uma malha de elementos finitos com 878 elementos triangulares e de profundidade constante igual a $1\ m$, conforme referido anteriormente. Os elementos da malha apresentam uma área média de $1.14\ m^2$ (**Figura 4.2**).

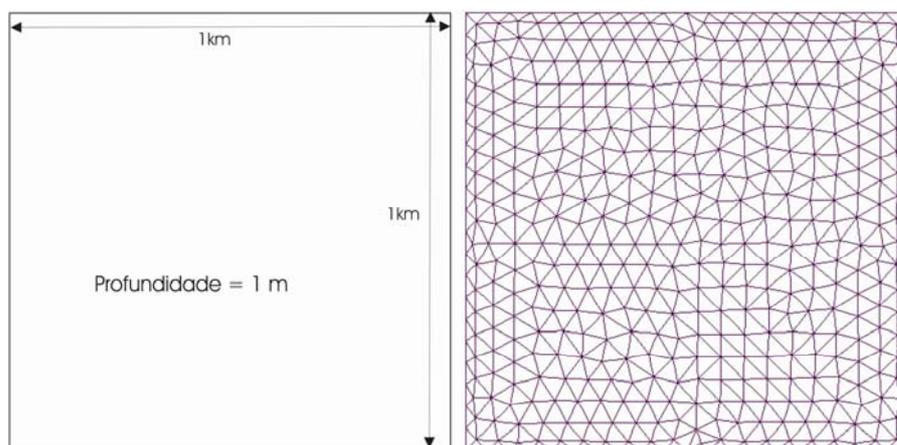


Figura 4.2 – Domínio considerado e malha de elementos finitos

Nesta simulação é considerado um derrame (**Simulação 1**) com uma concentração inicial de 1000 mg l^{-1} (localizada inicialmente na zona mais escura apresentada na figura 4.3 para o instante $T=0.08 \text{ h}$), transportada por uma corrente permanente com uma velocidade de valor 0.1 ms^{-1} segundo uma direcção de 45° em relação à horizontal, um coeficiente de dispersão de $0.1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, com um Δt de $0,08 \text{ h}$ e uma duração de 2 h . O resultado obtido pode ser observado na **Figura 4.3**.

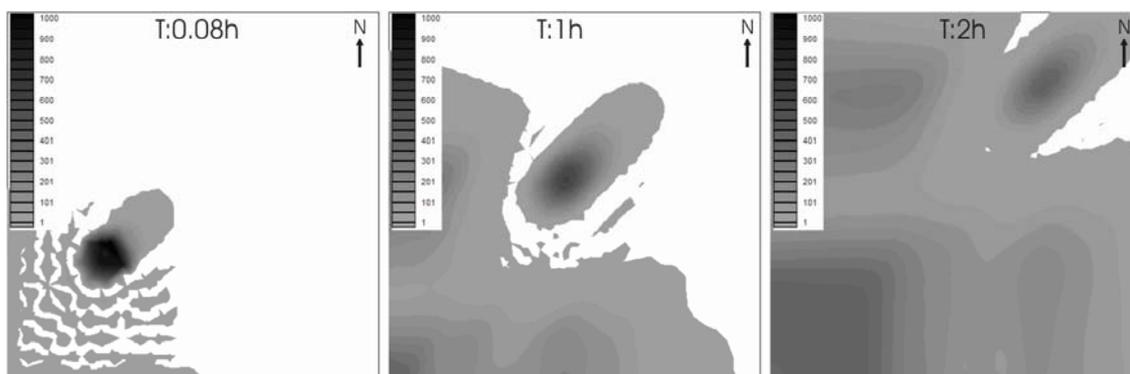


Figura 4.3 – Resultado da Simulação 1 (concentração em mg l^{-1})

Podemos verificar que ao longo da simulação surgem manchas não esperadas no domínio modelado. O aparecimento destas manchas resulta de erros inerentes ao método numérico utilizado pelo programa RMA4. O método utilizado pelo programa RMA4 necessita que seja imposto um coeficiente de dispersão que permita que para cada Δt haja uma mistura completa do poluente analisado em cada elemento (WES-HL, 2000). Quando esta situação não ocorre surgem zonas onde aparecem valores de concentração negativos (zonas próximas dos limites da mancha) que são

“compensados” através do aparecimento de manchas dispersas no domínio da simulação.

Esta situação pode ser alterada como se ilustra recorrendo à **Simulação 2**, desde que se considere um coeficiente de dispersão superior ao adoptado na simulação 1 ($1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$) (**Figura 4.4**).

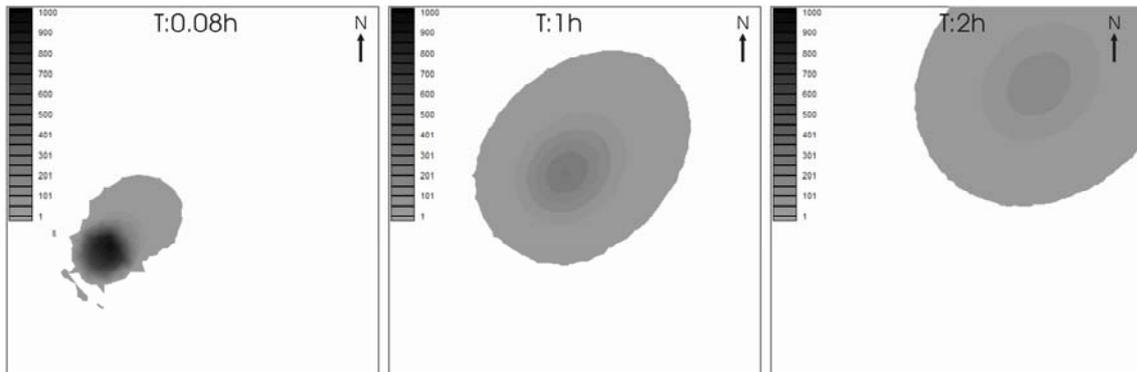


Figura 4.4 – Resultado da Simulação 2 (concentração em mg l^{-1})

Desta forma verifica-se uma diminuição dos erros numéricos no domínio. Nos instantes iniciais da simulação, que envolvem gradientes de concentração mais elevados, são aparentes erros numéricos maiores.

Outro factor analisado na diminuição dos erros numéricos foi a consideração de um intervalo de integração mais pequeno. Na **Simulação 3** adoptam-se os mesmos valores dos parâmetros utilizados na Simulação 2, diminuindo-se apenas o Δt para 0.05 h (**Figura 4.5**).

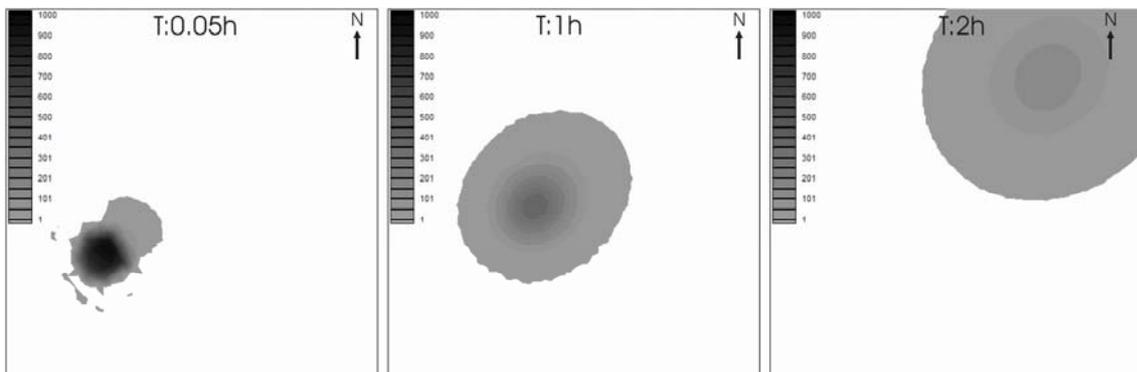


Figura 4.5 - Resultado da Simulação 3 (concentração em mg l^{-1})

Verifica-se uma pequena diminuição das instabilidades numéricas nos momentos iniciais, sem alterações significativas dos resultados correspondentes aos instantes finais. A diminuição do intervalo de tempo de cálculo tem como consequência o aumento do número de intervalos de cálculo (de 25 intervalos para 40 intervalos) para a simulação. Este aumento implica um aumento do tempo de cálculo necessário (duplicação do tempo de cálculo) obtendo-se resultados que acabam por não diferir significativamente dos obtidos com a simulação em que se adopta um Δt de 0.08 h.

Assim, neste caso, a diminuição do intervalo de tempo de cálculo não se mostrou uma estratégia útil para a diminuição das instabilidades numéricas na simulação aqui apresentada.

Foi ainda considerado o efeito do aumento da resolução da malha de elementos finitos, e consequente diminuição do tamanho dos elementos.

Foi considerado um cenário envolvendo uma malha de elementos finitos para o mesmo domínio dos cenários anteriores com 3358 elementos triangulares quadráticos, com uma área média de aproximadamente 0.3 m^2 (**Figura 4.6**).

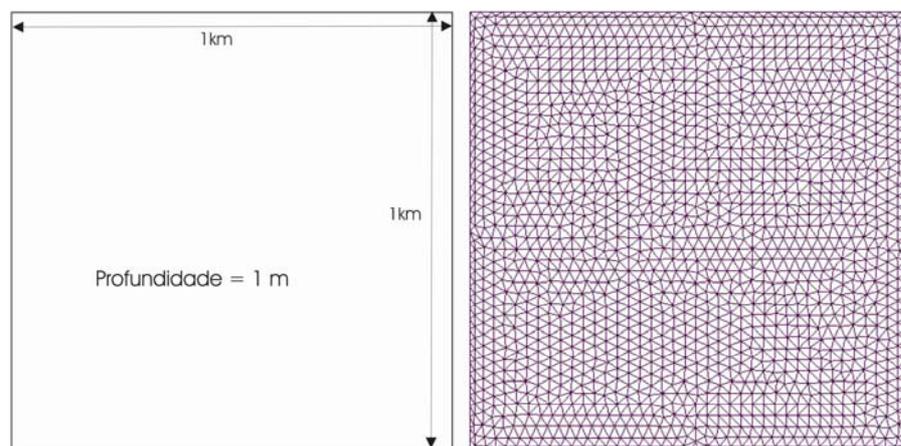


Figura 4.6 – Domínio considerado e malha refinada de elementos finitos

Na **Figura 4.7** apresentam-se os resultados obtidos.

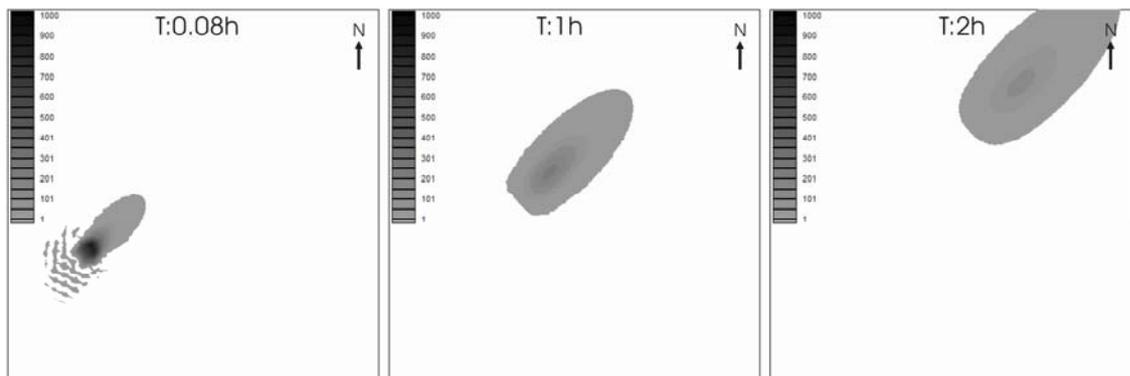


Figura 4.7 – Resultado da Simulação 4 (concentração em mg l^{-1})

É claramente visível a diferença de resultados alcançados entre a Simulação 1 e a Simulação 4. Nesta última, alterando apenas a malha de elementos finitos, obteve-se um resultado com erros numéricos menores.

Como seria de esperar, a resolução da malha é de extrema importância na utilização deste modelo. Um aspecto negativo dum eventual refinamento da malha é a maior exigência em termos computacionais para efectuar as simulações. No entanto, poderá adoptar-se um procedimento de cálculo recorrendo-se a malhas adaptativas durante as simulações, conseguindo-se desta forma uma solução de compromisso entre a qualidade dos resultados obtidos e o tempo de cálculo necessário.

Na **Simulação 5** consideram-se os mesmos valores dos parâmetros adoptados na Simulação 4, alterando apenas o coeficiente de dispersão para $1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (**Figura 4.8**).

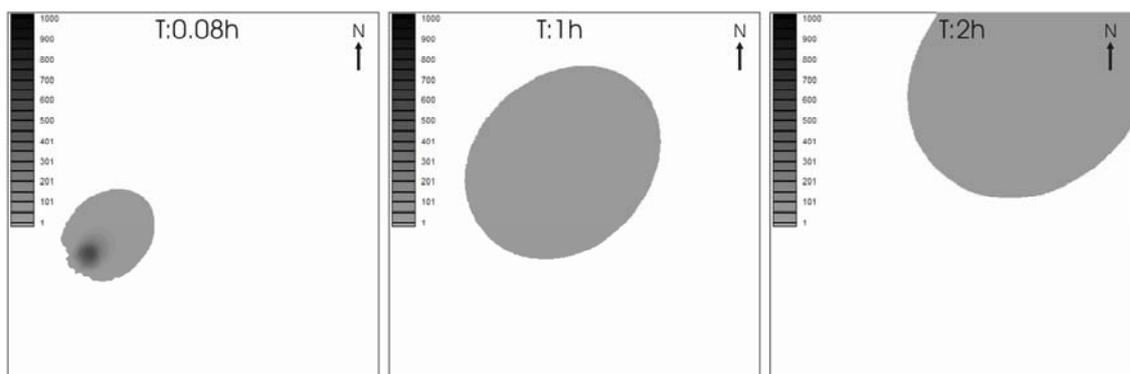


Figura 4.8 – Resultado da Simulação 5 (concentração em mg l^{-1})

Em relação à primeira simulação, verificou-se a diminuição dos erros numéricos para os instantes iniciais, obtendo-se uma solução em que o espalhamento da mancha é superior.

Para testar uma situação de derrame contínuo de um produto petrolífero foram realizadas as **Simulações 6 e 7 (Figura 4.9 e Figura 4.10)**. Nestas duas simulações foram considerados os mesmos valores dos parâmetros das simulações 4 e 5, mas considerando uma fonte pontual contínua de $1000 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ de produto derramado e com um coeficiente de dispersão de $0.1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ para a Simulação 6 e de $1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ para a Simulação 7.

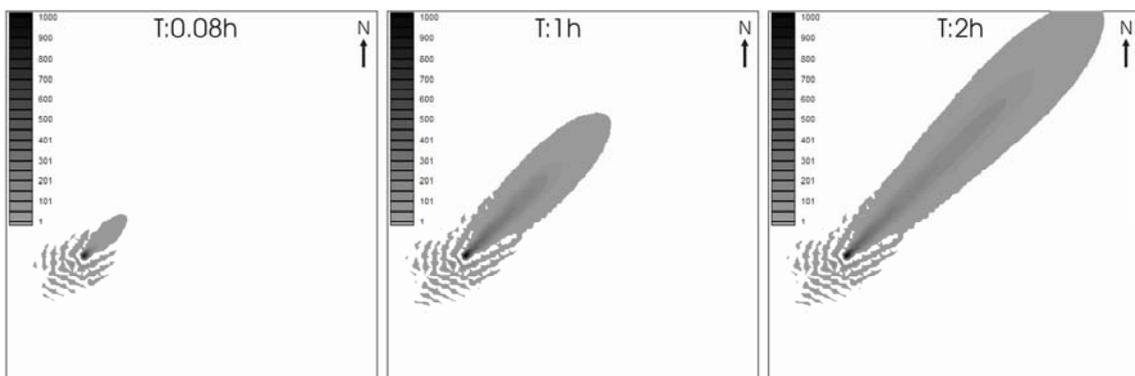


Figura 4.9 – Resultado da Simulação 6 (concentração em mg l^{-1})

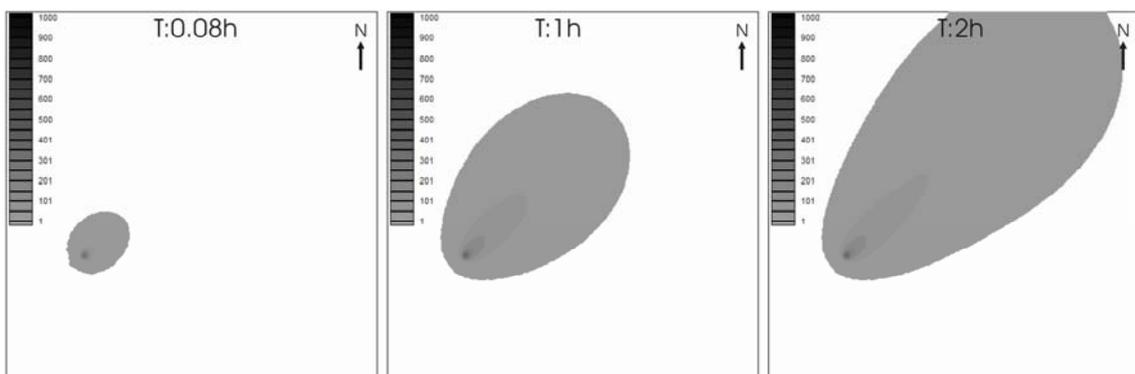


Figura 4.10 – Resultado da Simulação 7 (concentração em mg l^{-1})

Mais uma vez é evidente o efeito do valor adoptado para o coeficiente de dispersão nos resultados obtidos. Pode-se verificar que os erros numéricos são mais intensos nos momentos iniciais junto do ponto de emissão.

De forma a avaliar o desempenho do modelo a situações de derrames no oceano, envolvendo regiões mais largas foi considerado um domínio de forma semelhante ao considerado nas simulações anteriores mas com uma extensão de 100 km por 100 km (Figura 4.11).

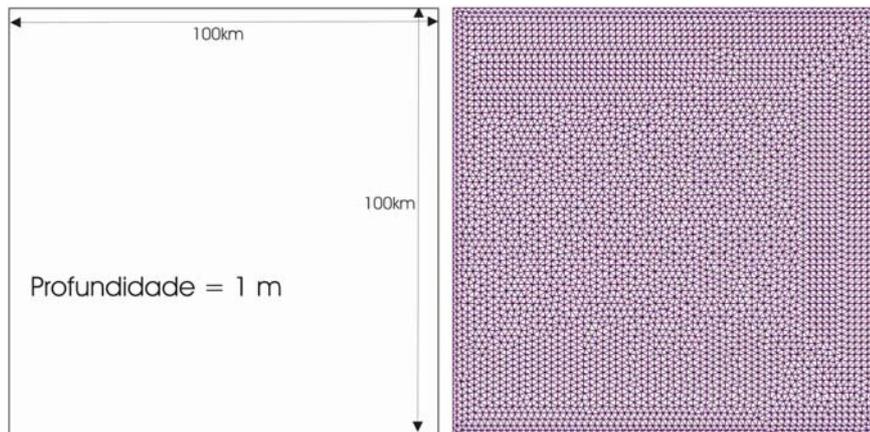


Figura 4.11 - Domínio alargado e respectiva malha de elementos finitos

A malha de elementos utilizada possui 9244 elementos triangulares quadráticos com uma área média de aproximadamente 1.08 km^2 por elemento.

Foi simulado um derrame com uma concentração inicial de 1000 mg l^{-1} , movido por uma corrente com velocidade igual a 1 ms^{-1} segundo uma direcção de 45° em relação à base do domínio quadrangular, foi considerado um coeficiente de dispersão de $50 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, um Δt de $0,5 \text{ h}$ e uma duração de 12 h (Simulação 8 na Figura 4.12). Uma vez que os elementos da malha de elementos finitos na presente simulação são maiores do que os utilizados na situação anterior o valor do coeficiente de dispersão também teve que ser ajustado de forma a se conseguir obter soluções convergentes. Considerou-se uma corrente de elevada intensidade para avaliar o desempenho do programa neste tipo de situações.

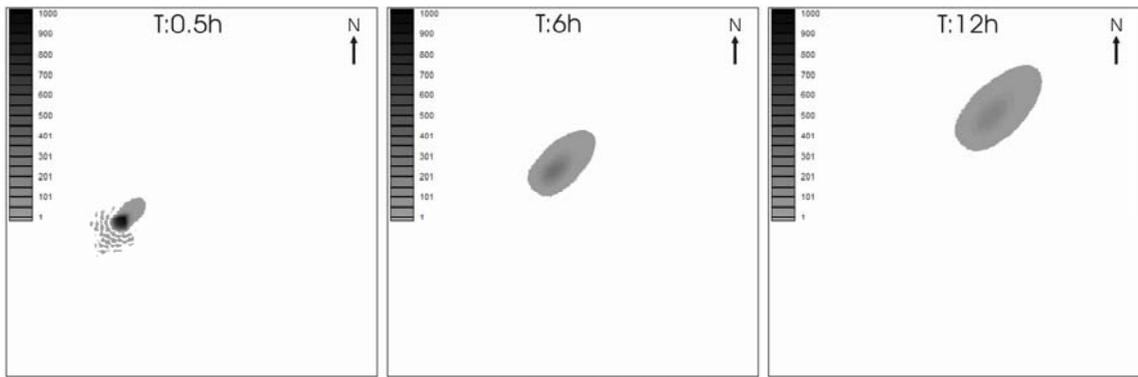


Figura 4.12 – Resultado da Simulação 8 (concentração em mg l^{-1})

Utilizando um coeficiente de dispersão superior ao anterior ($250 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$), os erros encontrados nos instantes iniciais da simulação podem ser diminuídos. Os resultados podem ser observados na **Figura 4.13 (Simulação 9)**.

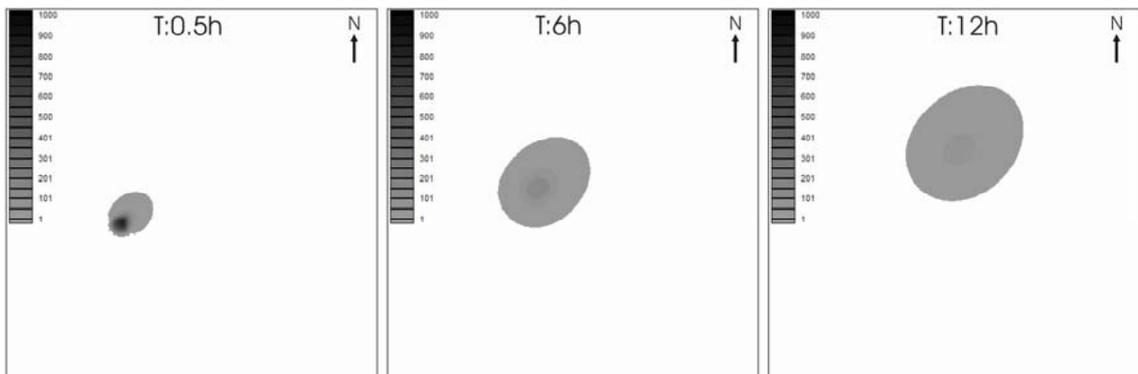


Figura 4.13 – Resultado da Simulação 9 (concentração em mg l^{-1})

Os resultados para a emissão contínua podem ser observados nas **Figura 4.14 e Figura 4.15 (Simulações 10 e 11)**. A fonte de emissão é de $1000 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

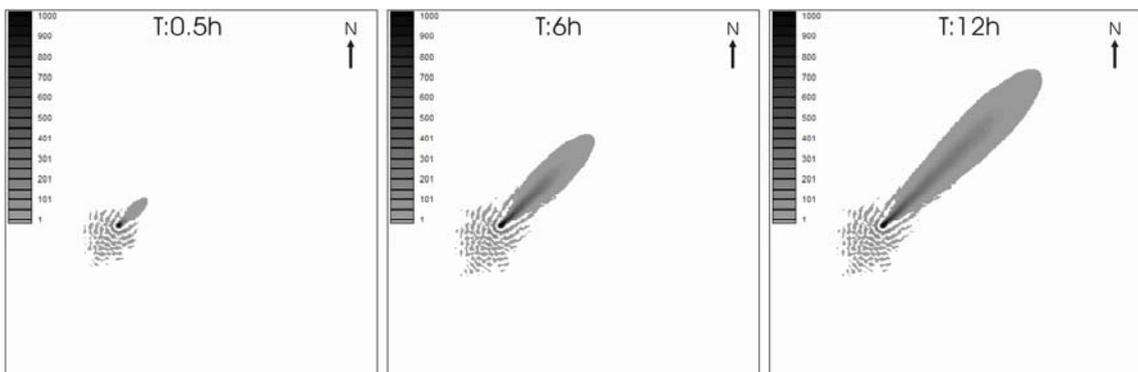


Figura 4.14 – Resultado da Simulação 10 (concentração em mg l^{-1})

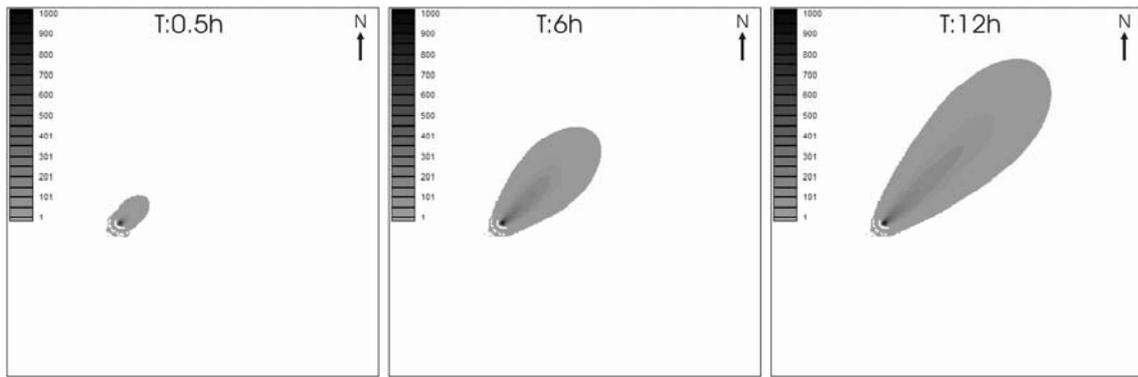


Figura 4.15 – Resultado da Simulação 11 (concentração em mg l^{-1})

A simulação 10 apresenta um coeficiente de dispersão de $50 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ e a Simulação 11 um coeficiente de dispersão de $250 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$.

Na **Simulação 12**, considera-se uma situação de derrame com uma concentração inicial de 1000 mg l^{-1} , transportado por uma corrente inicial (das 0 h às 4 h) de 1 ms^{-1} proveniente de sudoeste, e a partir das 4 h um campo com o mesmo valor mas apenas a apontar para leste e a partir das 8 h para norte (Figura 4.16).

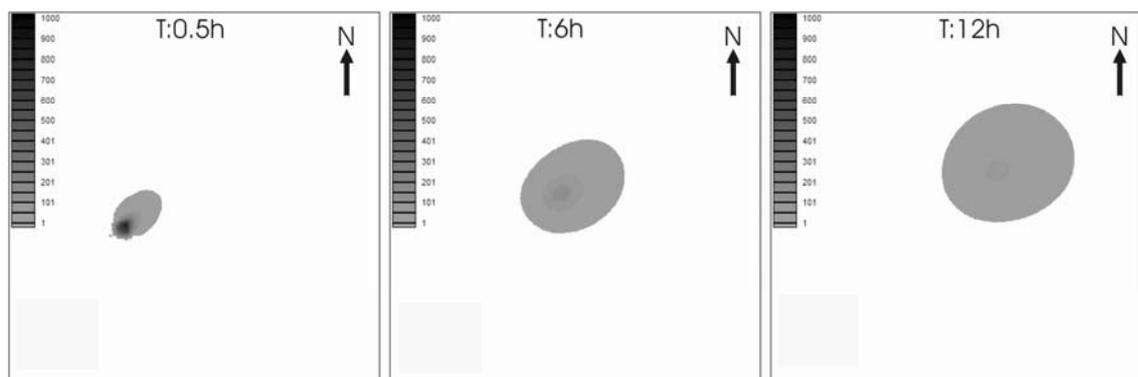


Figura 4.16 – Resultado da Simulação 12 (concentração em mg l^{-1})

A maioria das simulações realizadas apresenta *números de courant* próximos de 1, no entanto apresentaram níveis de erro associado bastante diferentes. Isto deve-se, tal como já referido anteriormente, ao método de cálculo utilizado pelo modelo RMA4 onde este erro necessita de ser corrigido com um ajuste do coeficiente de dispersão (WES-HL, 2000).

Assim, o aumento da resolução da malha de elementos finitos permite diminuir o erro numérico associado. No entanto, um aumento da resolução leva a um aumento do

número de elementos totais, e conseqüentemente a um aumento do número de operações a serem realizadas pelo modelo e maior tempo total de cálculo.

O modelo apresenta tempos de cálculo que vão desde aproximadamente 10 minutos (para a situação de um derrame de 2 horas numa área de 1 km^2 com uma malha de 878 elementos) até mais de 45 minutos (para a situação de um derrame de 12 horas numa área de 1000 km^2 com uma malha de 9244 elementos). Os tempos de cálculo dependem muito da velocidade de processamento dos computadores utilizados. Nestas simulações, foram utilizados computadores com velocidades de processamento próximas dos 2 GHz . Desta forma, a diminuição do Δt levaria à existência de um maior número de operações de cálculo, logo a um maior tempo de simulação total. Isto leva a que a definição do Δt esteja muito limitada, se quisermos ter resultados em tempo útil.

Assim, uma boa resolução da uma malha de elementos e o coeficiente de difusão mostram-se como os principais factores a ter em conta para o aparecimento dos erros numéricos.

4.1.2. Avaliação do desempenho do modelo Lagrangeano

Devido às suas características (descritas no capítulo 3), o modelo lagrangeano, apresenta limitações diferentes das encontradas nos modelos eulerianos.

No entanto, estes modelos descrevem de forma diferente a concentração e os fenómenos de dispersão dos poluentes.

Definindo uma massa inicial do produto derramado, o modelo lagrangeano (GNOME), calcula o deslocamento dessa massa inicial com base nos campos de velocidades estabelecidos a partir de valores observados ou resultantes de simulações com modelos hidrodinâmicos. A estratégia utilizada para simular a concentração e os fenómenos de dispersão consiste em simular a deslocação de várias partículas inicialmente agregadas e definir uma lei de dispersão (turbulenta) entre elas relacionada com a dispersão mássica turbulenta. O número de partículas é directamente proporcional à quantidade de massa.

Foi simulado um derrame de 10 ton num domínio com uma área de 1 km^2 ($1 \text{ km} \times 1 \text{ km}$), onde se verifica uma velocidade de 0.1 m s^{-1} , um coeficiente de dispersão de $0.1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ com um Δt de 0.08 h e uma duração de 2 h . O resultado da **Simulação 13** pode ser observado na **Figura 4.17**.

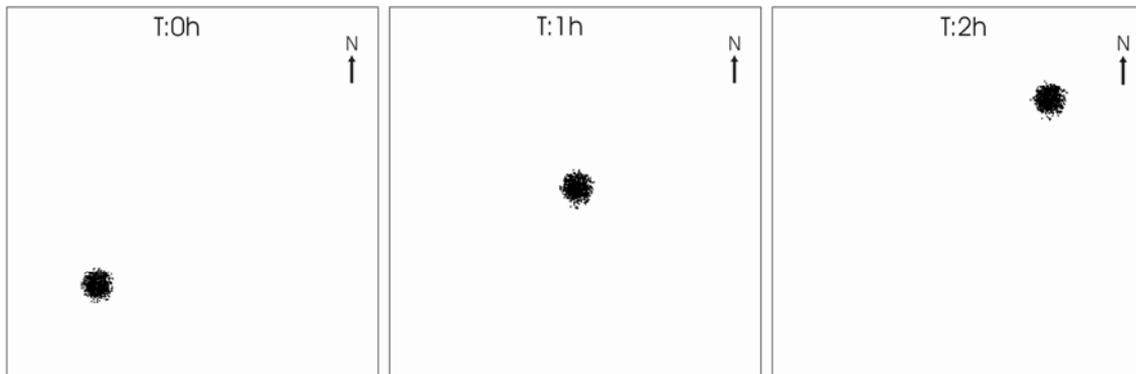


Figura 4.17 – Resultado da Simulação 13

A utilização de um coeficiente de dispersão mais elevado ($1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$) pode ser observado na **Simulação 14** (**Figura 4.18**).

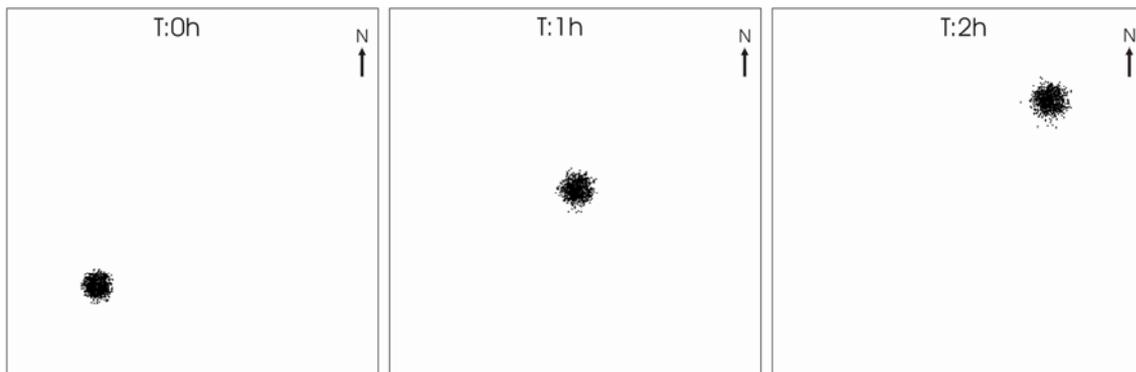


Figura 4.18 – Resultado da Simulação 14

Na **simulação 15** (**Figura 4.19**) foi utilizado um intervalo de tempo de cálculo inferior ao anterior ($0,05$)

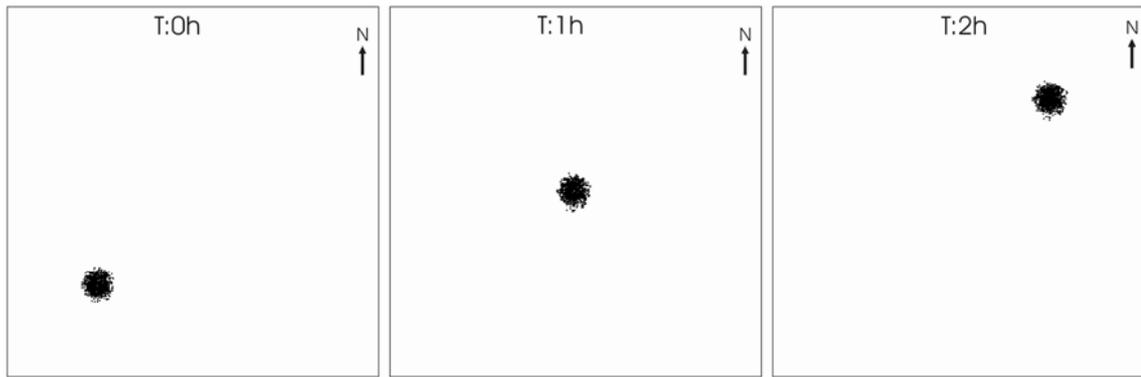


Figura 4.19 – Resultado da Simulação 15

A **Simulação 16** apresenta uma situação de derrame contínuo de uma quantidade total de 10 ton durante as 2 h, nas mesmas condições da simulação anterior (**Figura 4.20**).

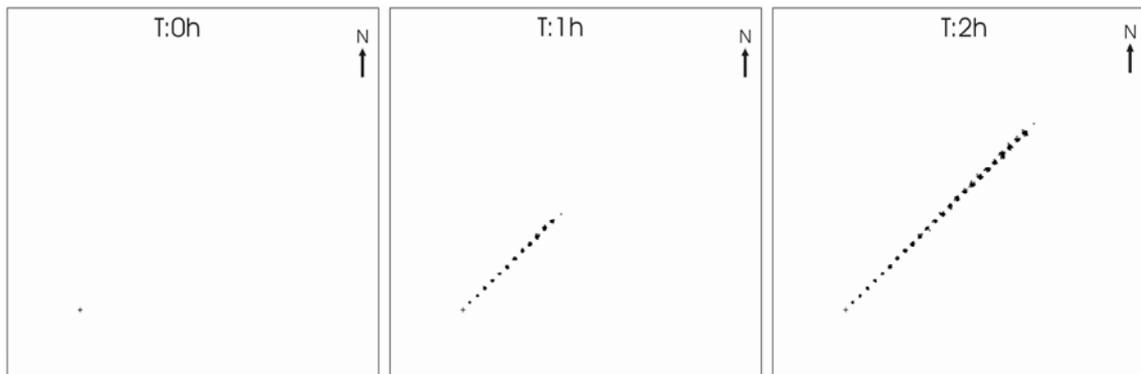


Figura 4.20 – Resultado da Simulação 16

Na **simulação 17** (**Figura 4.21**) foi utilizado um coeficiente de dispersão de 1 m^2/s .

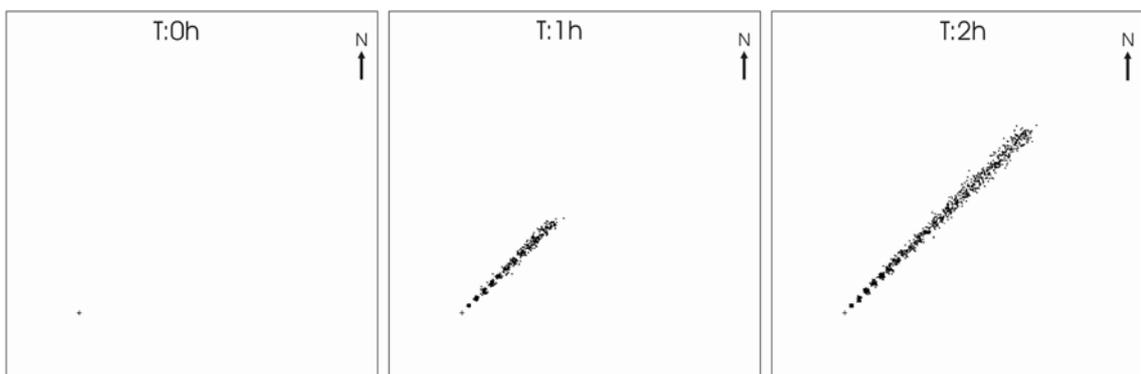


Figura 4.21 – Resultado da Simulação 17

As dificuldades evidenciadas pelo modelo euleriano utilizado na simulação do transporte de massa em zonas de acentuado gradiente de concentração (limites das manchas de produto derramado) não ocorrem no modelo lagrangeano. Por outro lado, dada a simplicidade dos algoritmos utilizados no modelo lagrangeano o tempo de cálculo neste modelo são muito mais curtos do que no modelo euleriano.

No entanto, verifica-se que este modelo não permite simular directamente a distribuição espacial e temporal da concentração. Esta análise terá que ser feita posteriormente, através de ferramentas de análise criadas para o efeito que permitam calcular a concentração a partir da distribuição espacial de partículas. (NOAA, 2004)

Resta avaliar o desempenho do modelo para problemas que envolvam domínios de maior dimensão. Para isto simulou-se uma situação de derrame de 10^4 ton num domínio de 10000 km^2 ($100\text{km} \times 100\text{km}$), com uma corrente de valor 1 ms^{-1} , um coeficiente de dispersão de $50 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ com um Δt de $0,5 \text{ h}$ e uma duração de 2 h . O resultado da **Simulação 18** pode ser observado na **Figura 4.22**.

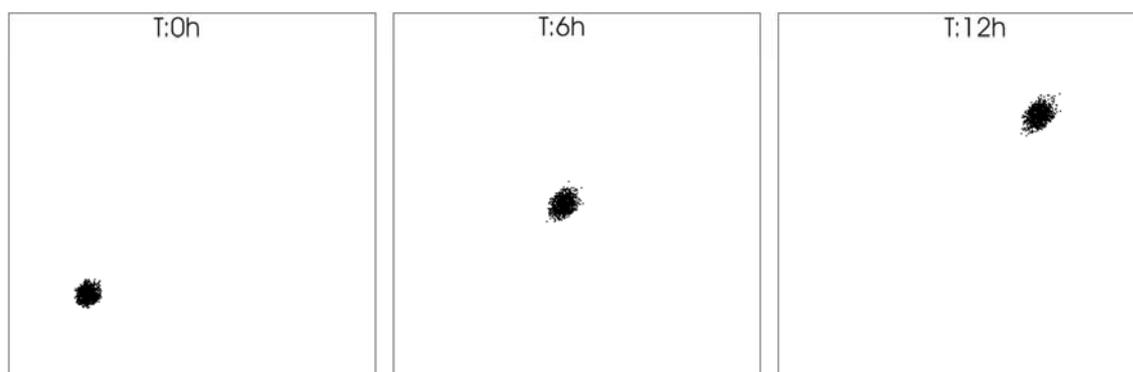


Figura 4.22 – Resultado da Simulação 18

Na **Simulação 19** considerou-se um coeficiente de dispersão de $250 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ (**Figura 4.23**).

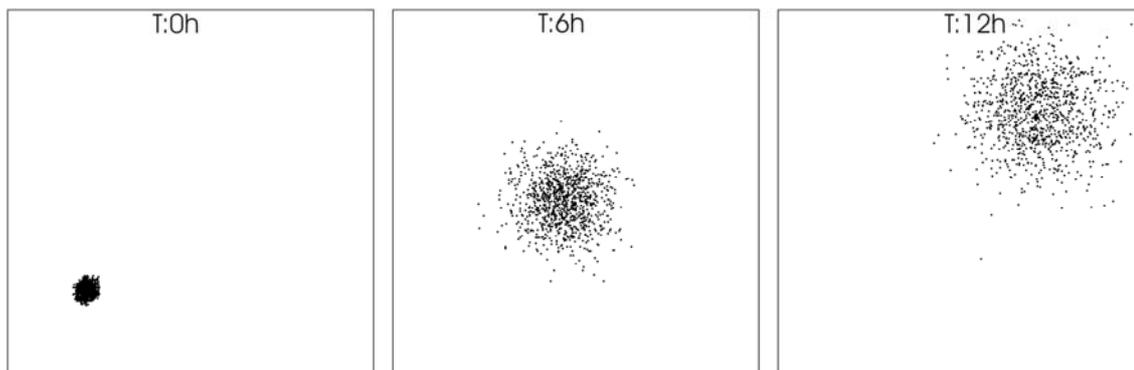


Figura 4.23 – Resultado da Simulação 19

A **Simulação 18** apresenta um derrame contínuo de uma quantidade total de 10^4 ton durante as 12 h com um coeficiente de dispersão de $10^6 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ (**Figura 4.24**).

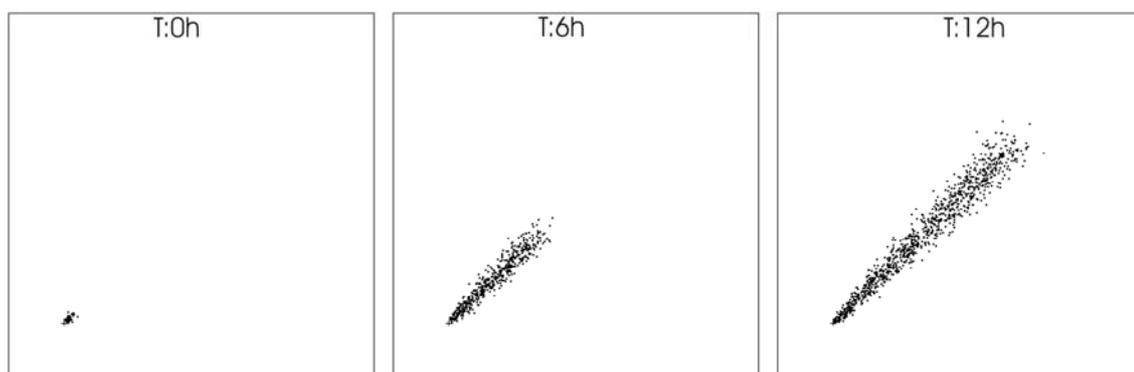


Figura 4.24 – Resultado da Simulação 20

O modelo lagrangeano apresenta tempos de cálculo muito baixos (praticamente o mesmo tempo necessário para a visualização dos resultados).

Dado ao baixo tempo de cálculo apresentado, o modelo lagrangeano mostra-se mais adequado para a utilização em simulações de longa duração de tempo.

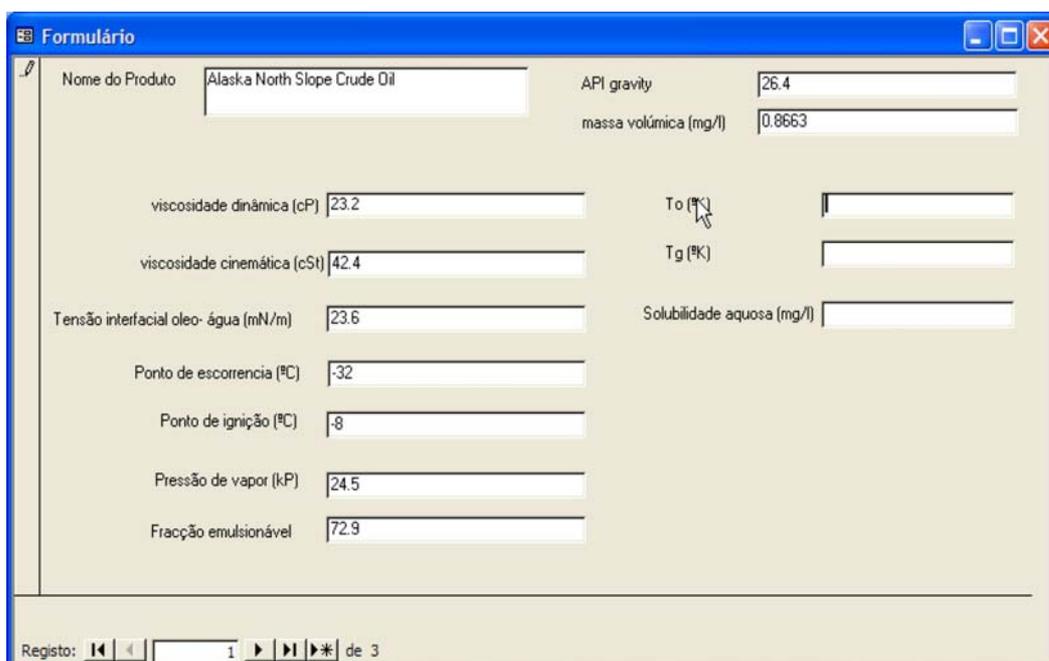
O modelo lagrangeano, não apresenta as mesmas limitações apresentadas pelo modelo euleriano em termos de definição do coeficiente de dispersão. Isto permite que sejam definidos quaisquer valores para este parâmetro, sendo os inseridos pelo utilizador mais próximos dos valores reais.

4.2. Base de dados de características de produtos petrolíferos e de acidentes

4.2.1. Características de produtos petrolíferos

Foi construída uma base de dados de características de produtos petrolíferos em *Microsoft Access*. Esta base de dados tem como finalidade complementar a informação disponível, através da inclusão de dados relativos a características de novos produtos petrolíferos.

Sempre que se disponibilizem novas informações sobre características de produtos petrolíferos, estas podem ser registadas através de um formulário na base de dados (**Figura 4.25**). Estas novas informações podem ter origem em dados laboratoriais ou em dados provenientes de produtores de petróleo, entre outros.



| Nome do Produto | API gravity |
|-------------------------------------|-------------|
| Alaska North Slope Crude Oil | 26.4 |
| viscosidade dinâmica (cP) | 23.2 |
| viscosidade cinemática (cSt) | 42.4 |
| Tensão interfacial óleo-água (mN/m) | 23.6 |
| Ponto de escorrença (°C) | -32 |
| Ponto de ignição (°C) | -8 |
| Pressão de vapor (kP) | 24.5 |
| Fracção emulsionável | 72.9 |
| massa volúmica (mg/l) | 0.8663 |
| To (°K) | |
| Tg (°K) | |
| Solubilidade aquosa (mg/l) | |

Registo: 1 de 3

Figura 4.25 – Formulário de registo de características de produtos petrolíferos

4.2.2. Base de dados de acidentes

Foi criado um formulário de entrada para os dados relativos aos acidentes ocorridos, onde podem ser registados dados como a localização geográfica, quantidade derramada e tipo de produto (**Figura 4.26**). Estes dados serão úteis para organizar a informação dispersa sobre os dados do acidente, de forma a melhor descrever as condições dos derrames no mar.

The image shows a web browser window with a form titled "Formulário". The form is used for recording accident data. It contains the following fields:

- Nome do Acidente: Prestige
- Data: 13 de Novembro de 2002
- Nome do navio: N/T Prestige
- Origem do navio: Bahamas
- Tipo de Navio: Navio Tanque
- Local do acidente: Atlantico Norte
- latitude: [empty]
- longitude: [empty]
- Tipo de produto derramado: [empty]
- Quantidade transporta: [empty]
- Quantidade derramada: [empty]
- Descrição histórica: [empty text area]

At the bottom of the form, there is a navigation bar with the text "Registo: 1 de 1" and navigation icons.

Figura 4.26 – Formulário de registo de dados do acidente

4.3. Implementação e análise dos modelos de degradação

As equações descritivas dos processos de degradação dos produtos derramados em ambiente marinho (Capítulo 2), foram implementadas em código *FORTRAN*, de forma a tornar possível a simulação destes processos.

4.3.1. Implementação e análise do modelo de degradação físico-química

Para analisar a os processos de degradação dos hidrocarbonetos em meio marinho, foram implementadas em código *FORTRAN* as equações 2.13, 2.14, 2.15, 2.16, 2.17, 2.19 e 2.20 numa ferramenta que permite efectuar a integração numérica de equações diferenciais pelo método *runge-kutta*. A implementação destas equações deu origem ao programa *OILDEGRAD*, o qual permite simular a evolução de características e propriedades dos hidrocarbonetos derramados. A implementação destas equações foi testada em Pinho et al (2002).

Os dados da simulação da evolução das características de um derrame são descritas no **Quadro 4.2**.

Quadro 4.2 – Dados de um derrame para simulação do modelo OILDEGRAD (adaptado de Pinho et al, 2002).

| Parâmetros | Valores | Unidades |
|---------------------------|---------|-----------------------|
| Viscosidade | 5.3991 | cp (15°C) |
| Densidade | 0.857 | g/ml |
| Fracção inic. evaporada | 0 | |
| Fracção inic. de água | 0 | |
| Fracção final de água | 0.65 | |
| Fracção inic. dispersa | 0 | |
| Fracção inic. que retorna | 0 | |
| Área inic. | 4000000 | m ² |
| Volume inic. | 6000 | m ³ |
| Vel. Méd do vento | 4 | m/s |
| Temperatura | 292 | °K |
| T0 | 292 | °K |
| TG | 624 | °K |
| A | 6.3 | |
| B | 10.3 | |
| Tensão superficial | 30.09 | Dyne cm ⁻¹ |
| Constante K1 | 150 | s ⁻¹ |
| Constante C4 | 10.4 | |

Os resultados da evolução do volume, área e espessura estão apresentados na **Figura 4.27**.

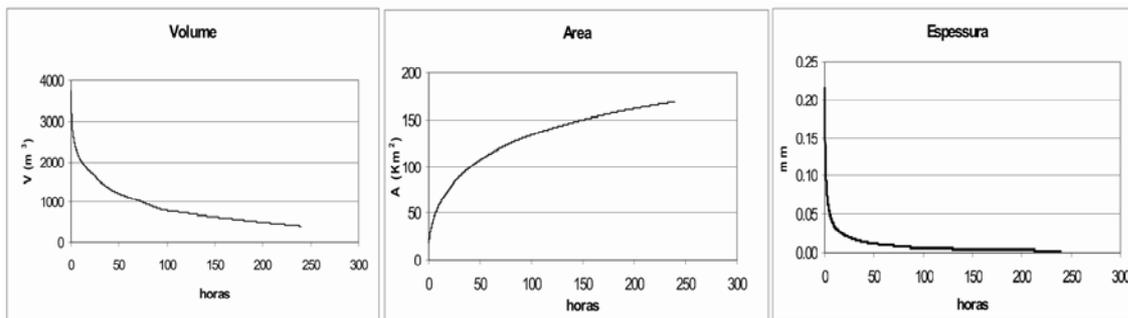


Figura 4.27 – Simulação da evolução do volume, área e espessura da mancha utilizando o modelo OILDEGRAD

Os resultados da evolução da evaporação, emulsificação e perda por dispersão estão apresentados na **Figura 4.28**.

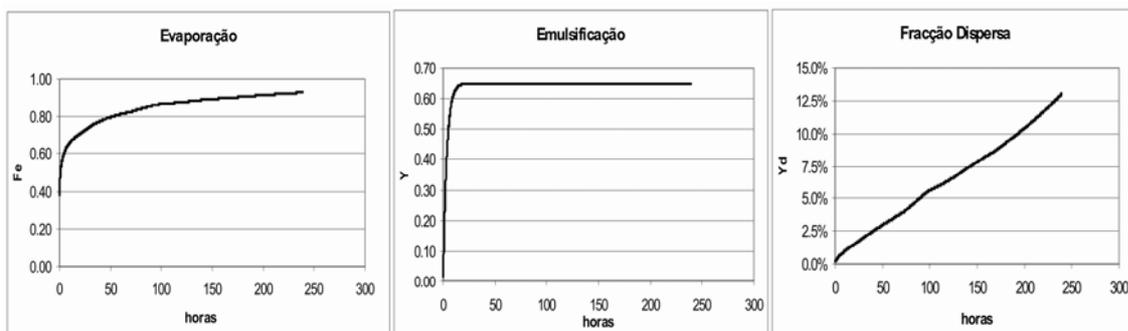


Figura 4.28 – Simulação da evolução da evaporação, emulsificação e perda por dispersão utilizando o modelo OILDEGRAD.

Os resultados da evolução da viscosidade e densidade estão apresentados na **Figura 4.29**.

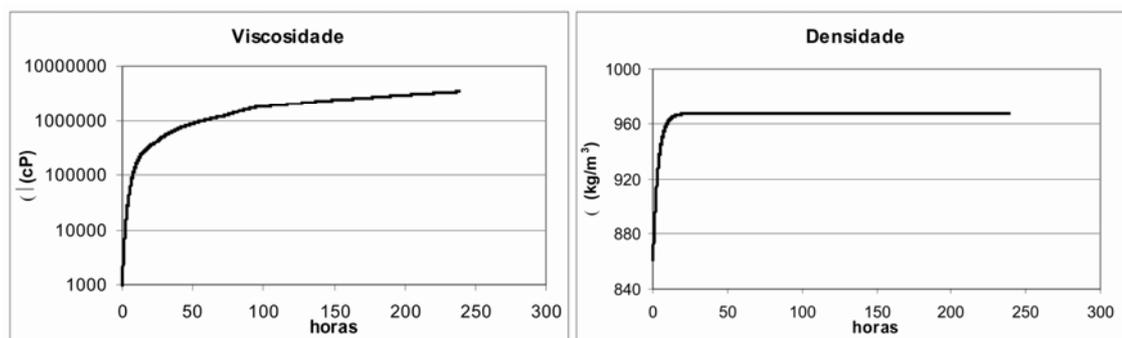


Figura 4.29 – Simulação da evolução da viscosidade e densidade utilizando o modelo OILDEGRAD.

Uma vez que não foi possível a comparação destes resultados com dados reais, a utilização deste modelo necessita de ser validada, através da comparação com outros dados. Esta análise é realizada no capítulo 5, através da comparação dos resultados do caso de estudo do N/T Prestige, simulados com o modelo OILDEGRAD e com o modelo ADIOS2.

4.3.2. Implementação e análise do modelo de degradação biológica

De forma a analisar a biodegradação dos hidrocarbonetos em meio marinho, foram implementadas em código FORTRAN as equações 2.21 a 2.26 numa ferramenta que permite efectuar a integração numérica de equações diferenciais pelo método *runge-kutta*. A implementação destas equações deu origem ao programa BIODEGRAD, o qual simula a degradação biológica do substrato biodisponível e o crescimento microbiano consequente, o processo de biodisponibilização de substrato e a degradação total deste substrato. Este modelo necessita apenas que se definam os parâmetros cinéticos de reacção e as concentrações iniciais.

O **Quadro 4.3** apresenta os valores dos parâmetros cinéticos e as concentrações iniciais utilizadas para a simulação da biodegradação de um hidrocarboneto.

Quadro 4.3 – Parâmetros cinéticos e condições iniciais da simulação da biodegradação de um hidrocarboneto

| Parâmetros ou condições | Valor |
|--|-------|
| Parâmetros Biocinéticos | |
| μ_{max} (h ⁻¹) | 0.02 |
| K_s (mg.l ⁻¹) | 0.24 |
| Y (mg/mg) | 0.8 |
| Parâmetros do Sistema | |
| C_{max} (mg.l ⁻¹) | 20 |
| k (m ³ .h ⁻¹) | 0.01 |
| Condições Iniciais | |
| $C_{n\grave{a}o\ disponivel_{in}}$ (mg.l ⁻¹) | 100 |
| $C_{bi\ disponivel_{in}}$ (mg.l ⁻¹) | 0 |
| $C_{total_{in}}$ (mg.l ⁻¹) | 100 |
| B_{in} (mg.l ⁻¹) | 3 |

Os resultados de uma simulação de 500 horas utilizando o programa BIODEGRAD podem ser visualizados na **Figura 4.30**. O Δt utilizado na simulação foi de 0.5 horas.

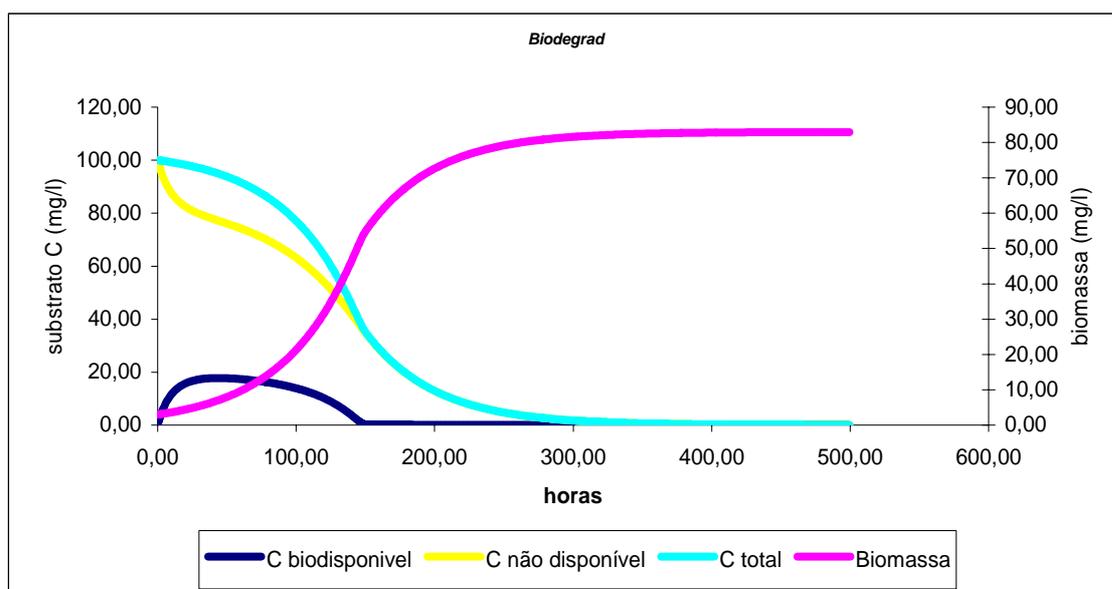


Figura 4.30 - Resultados de biodegradação do modelo Biodegrad

A utilização do modelo BIODEGRAD foi testada com os dados experimentais obtidos por Rodrigues (2003) da degradação biológica de um Hidrocarboneto Aromático Policíclico (fluoreno) (Gomes *et al*, 2003b). Os resultados são apresentados na **Figura 4.31**.

Foi utilizada uma concentração inicial de 100 mg/l (os dados apresentados da fase sólida medida nos momentos iniciais não coincidem com este valor devido ao método analítico utilizado não ter conseguido medir a fase sólida total nesse período),

com uma concentração de biomassa (SSV) de cerca de 321 mg/l. No início toda a massa de fluoreno se encontra em fase sólida sob a forma de cristais. Uma vez em contacto com o meio aquoso estes cristais irão dissolver-se até se atingir a concentração máxima de solubilidade de 1,9 mg/l. A partir desta concentração cessa o processo de mudança de fase (solubilização). A biomassa apenas pode alimentar-se (degradar) do fluoreno que se encontra em fase aquosa.

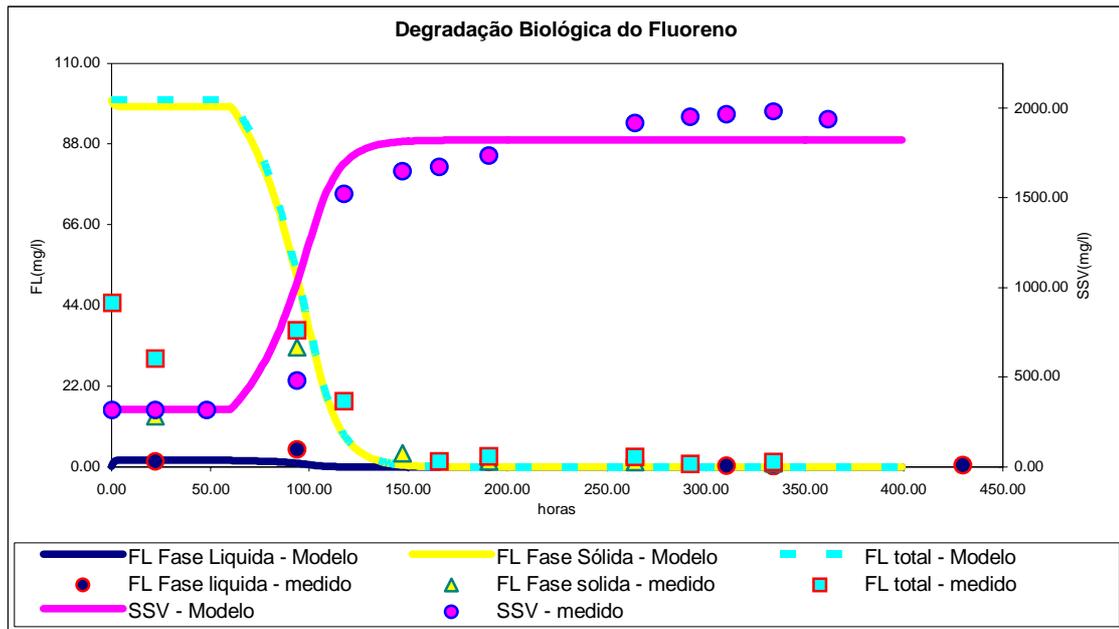


Figura 4.31 – Resultados de biodegradação do fluoreno do modelo Biodegrad

Nesta experiência existiu um período que se prolongou até cerca de 60 horas onde a biomassa necessitou de se adaptar ao substrato, não demonstrando por isso nenhum crescimento. A partir deste momento observou-se o consumo de fluoreno limitado pela taxa de transferência de massa entre fases, e conseqüente crescimento celular até ao momento em que toda a massa de fluoreno foi solubilizada e consumida.

Em comparação com os valores medidos pode-se verificar que o modelo é capaz de descrever os processos de biodegradação de um hidrocarboneto limitado pela taxa de transferência de massa.

5. CASO DE ESTUDO – DERRAME DO N/T *PRESTIGE*

De forma a gerir a informação criada e apresentada adiante, foi necessário recorrer a ferramentas que possibilitem essa gestão. A criação de um Sistema de Informação Geográfica (SIG) em ambiente *ArcView* (ESRI, 1996) permitiu desta forma agrupar a informação criada pelos modelos e as informações provenientes das bases de dados em um ambiente de visualização que permite mais facilmente a organização dessa informação.

Assim, toda a informação considerada relevante foi introduzida em formato *shapefile* (*shp*) no SIG criado (**Figura 5.1**).

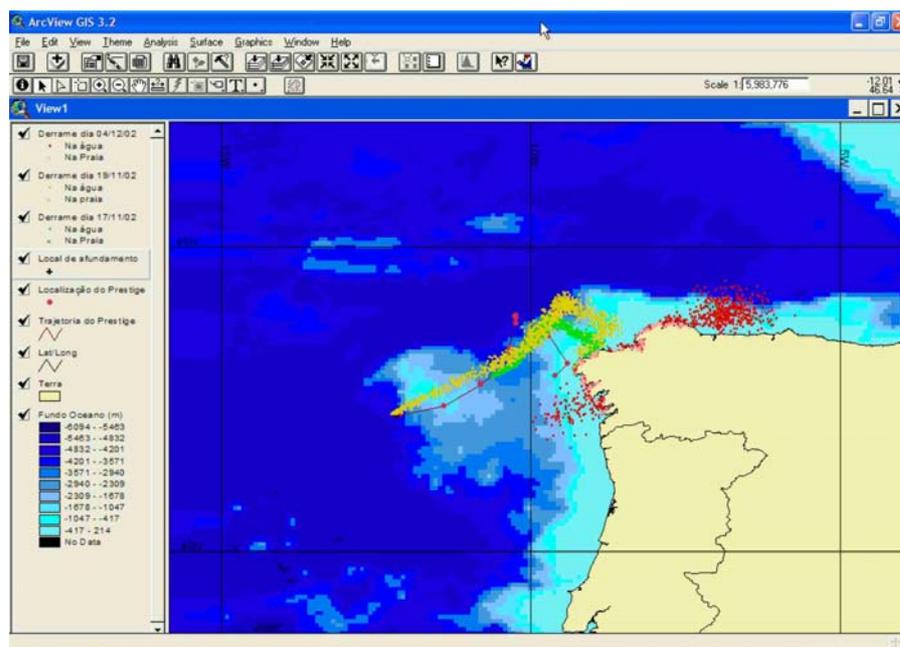


Figura 5.1 - Ambiente geoinformático ArcView

5.1. Bases de dados do Acidente

5.1.1. Histórico do Acidente

A 13 de Novembro de 2002, às 14:50 (GMT+01), o petroleiro *PRESTIGE*, embarcação de bandeira das Bahamas, emite um alerta ao longo do cabo Finisterra (Galiza, Espanha). O barco apresentava um rombo no casco e solicitava a evacuação. Os membros da tripulação são evacuados por helicóptero com excepção do capitão, o seu segundo e o chefe de máquinas. O barco apresenta uma avaria nas máquinas, não respondendo às manobras, e deriva em função das condições meteorológicas e oceanográficas.

O petroleiro carregava 77000 *Ton* de fuel pesado proveniente dos terminais de Ventspills, na Letónia e previamente de São Petersburgo. O seu destino era Singapura e estava prevista escala em Gibraltar. Às 17:00h locais (GMT+01), uma observação aérea levada a cabo pelas autoridades espanholas, localiza uma perda de petróleo no mar.

Durante a tarde do dia 13, diversas tentativas de rebocar o petroleiro acabaram sem êxito. Pela manhã de 14 de Novembro, acabam finalmente por conseguir rebocar o petroleiro, quando ele começava a aproximar-se da costa. Por esta altura o derrame do barco reduziu, sem no entanto cessar. Às 8:49 (GMT+01) o dia 14, o fuel vertido formava uma mancha que se estendia numa extensão de 40 *km* (entre as posições 43°4,8'N / 09°24,5'W e 42°54,7'N / 09°45,9'W) (**Figura 5.2**).

Na manhã de 15 de Novembro, o barco estava situado a cerca de 111 *km* da costa espanhola. As observações aéreas realizadas entre as 10:00 e as 11:00 mostram as manchas libertadas pelo barco na noite de 13 para 14 de Novembro durante a sua deriva. As mais próximas situam-se a uma distância entre 15-30 *km* da costa, a oeste e a norte do cabo Finisterra (entre as ilhas Sisargas e a ria de Muros). As manchas apresentam-se de tamanho variável, desde 5 *m* de diâmetro a 4 *km* de comprimento.



Figura 5.2 - Localização da mancha observada em 14 de Novembro de 2002

A 16 de Novembro pela manhã, o barco encontra-se a cerca de 50 milhas do cabo Tourinan. A fenda de 35 *m* observada no dia anterior, media agora mais de 53 *m*. A chegada das primeiras manchas à costa são observadas durante a manhã. O fuel atinge várias zonas entre a Corunha e Finisterra (**Figura 5.3**).

A 17 de Novembro às 9 h (GMT+01), o barco apresenta-se a cerca de 150 *km* a Oeste de Finisterra, nas coordenadas 42°47' N / 10°50,5' W. Os reconhecimentos aéreos efectuados durante esse dia mostram a presença de um mosaico de manchas coincidentes com a rota seguida pelo *Prestige* (**Figura 5.4**).



Figura 5.3 - Manchas de petróleo na costa espanhola (CEDRE, 2003)

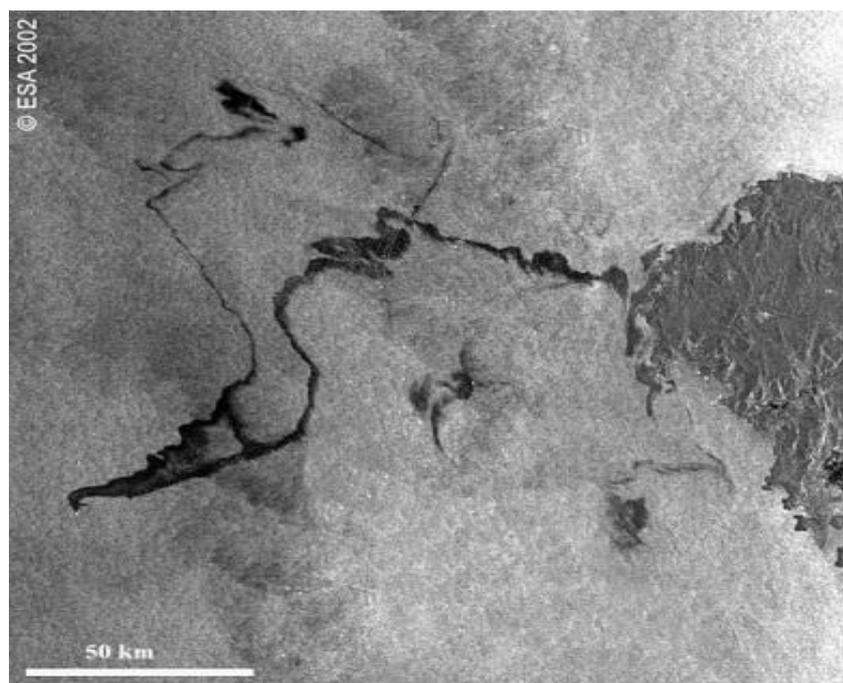


Figura 5.4 - Imagem de satélite do derrame no dia 17 de Novembro de 2002 (CEDRE, 2003)

Às 10 h do dia 18 de Novembro, o Prestige estava situado em $42^{\circ}26'N$ / $11^{\circ}24'W$, a cerca de 200 km a sudoeste de Finisterra.

A 19 de Novembro às 8:50 (GMT+01), o barco rompe-se em dois a $42^{\circ} 15' N$ e $12^{\circ} 08' W$, a 260 km da costa Oeste/Sudoeste do cabo Finisterra. A metade posterior do

barco afunda-se às 12 h a 42°12' N e 12°03' W a uma profundidade de cerca de 3000-4000 m. A parte dianteira afunda-se por volta das 16 h (**Figura 5.5**).



Figura 5.5 - Afundamento do N/T Prestige (CEDRE, 2003)

O *Centre de Documentacion de Recherche et d'Expérimentation sur les Pollution Accidentelles des Eaux* (CEDRE, 2003) acompanhou todo o historial do acidente com o petroleiro *Prestige*.

A **Figura 5.6** mostra o trajecto do petroleiro até o seu afundamento em 19 de Novembro de 2002.

A **Figura 5.7** mostra as posições e os dias onde foram observadas manchas (MeteoGalicia, 2002)

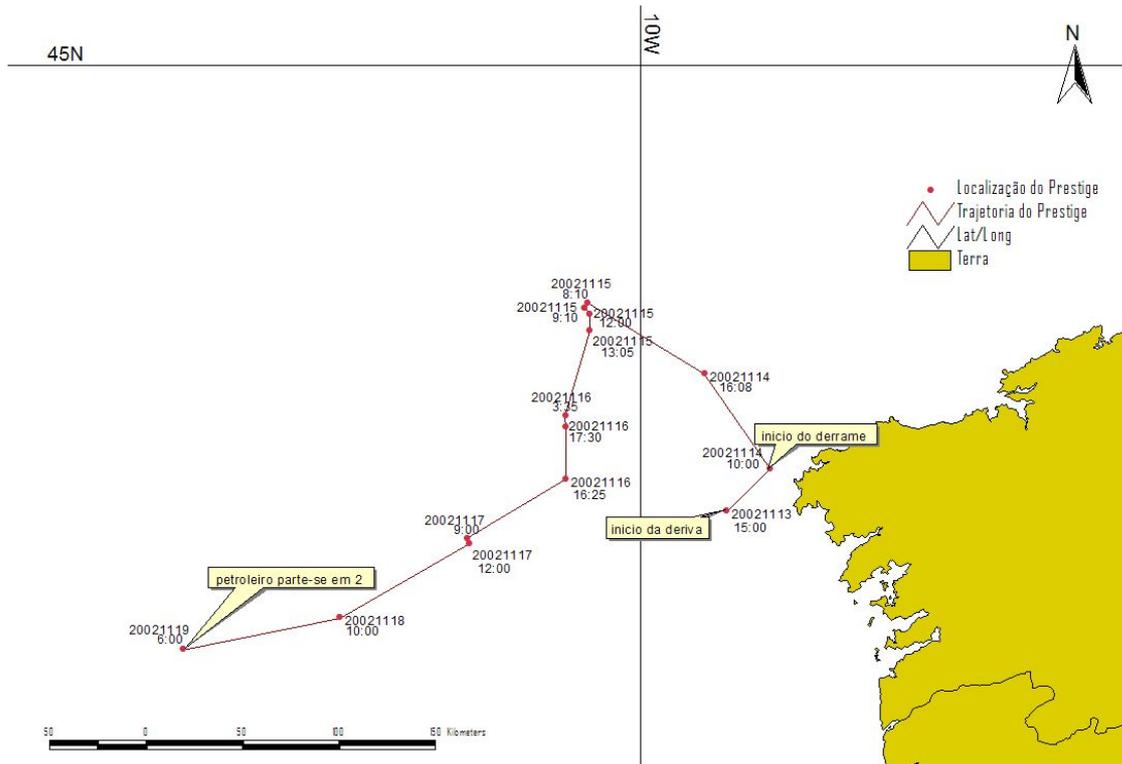


Figura 5.6 – Posições do petroleiro Prestige

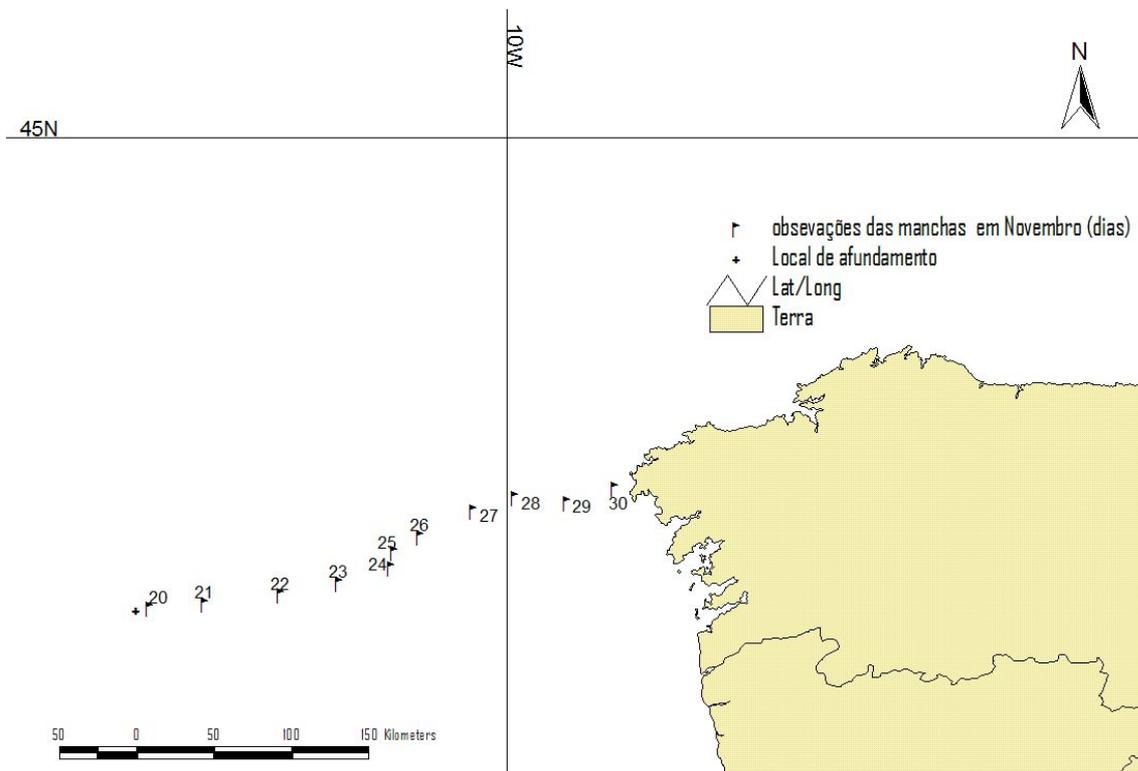


Figura 5.7 - Localização da mancha observada e respectivos dias

5.1.2. Material derramado

O produto derramado pelo Prestige é normalmente conhecido como **Fuel Oil nº.6** ou **Bunker C** (CEDRE, 2003), que possui uma viscosidade cinemática inicial de 611 *cS* e uma densidade próxima da água de 0,993 *g/cm³* (IFP, 2003)

Segundo estudos realizados (IFP, 2003), o produto apresenta uma curva de destilação com um ponto inicial de 192,6 °C e um ponto final de 725 °C, o ponto de escorrença é de 6 °C, e o teor de água do produto emulsionado é de cerca de 57 % (Wang et al, 2003).

As percentagens dos principais constituintes químicos do produto derramado pelo Prestige estão apresentadas no **Quadro 5.1** (IFP, 2003). Pode-se verificar que os hidrocarbonetos aromáticos representam mais da metade da composição do produto, seguido por uma grande parte de hidrocarbonetos saturados.

Uma descrição mais detalhada da constituição do produto derramado é apresentada no **Anexo B**.

Quadro 5.1 - Principais constituintes químicos do produto derramado pelo Prestige

| Família | Produto do Prestige (% mássica) |
|--------------------|------------------------------------|
| Saturados | 23 |
| Aromáticos | 54 |
| Resinas | 12.5 |
| Asfaltenos | 10.3 |
| Insolúveis ao DCM* | 0.2 |

*DCM: diclorometano

5.1.3. Dados de geográficos

A **Figura 5.8** apresenta os dados de batimetria retirados da base de dados ETOPO2.

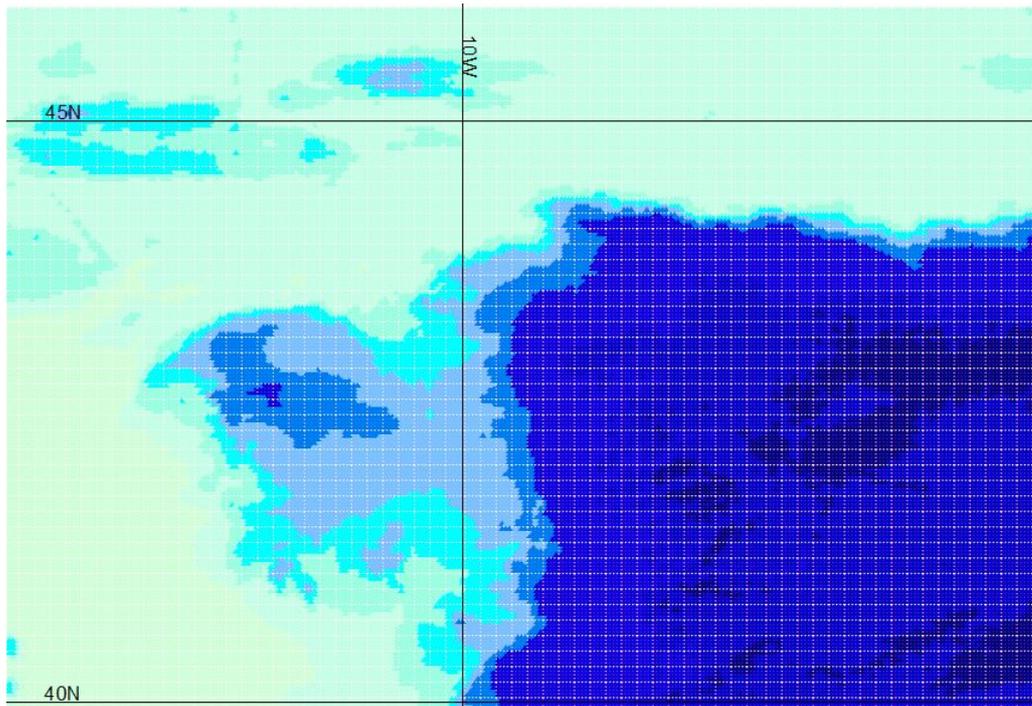


Figura 5.8 - Dados do ETOPO2 para o caso do N/T Presige

A **Figura 5.9** apresenta as linhas de costa retiradas da base de dados GSHHS.

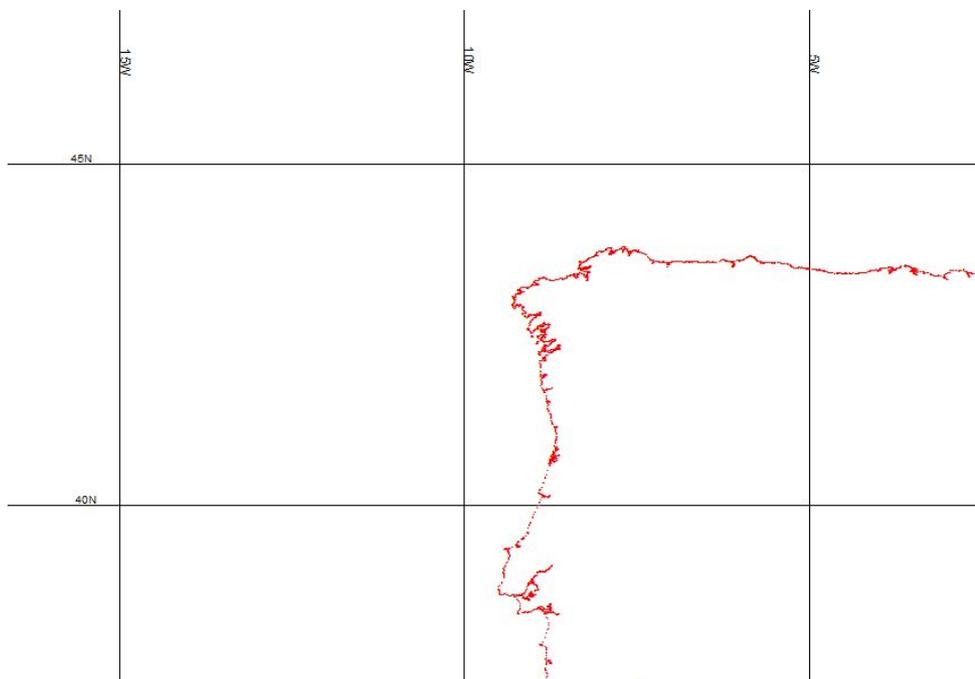


Figura 5.9 - Dados do GSHHS para o caso do N/T Presige

Estas informações serão importantes para definir o ambiente geoinformático do sistema de informação.

5.1.4. Dados Ambientais

Os dados relativos a temperatura e salinidade podem ser extraídos da base de dados *WOA*. Como exemplo podemos observar na **Figura 5.10** a temperatura média do mês de Novembro para a região do acidente do N/T Prestige da base de dados *Levitus94*.

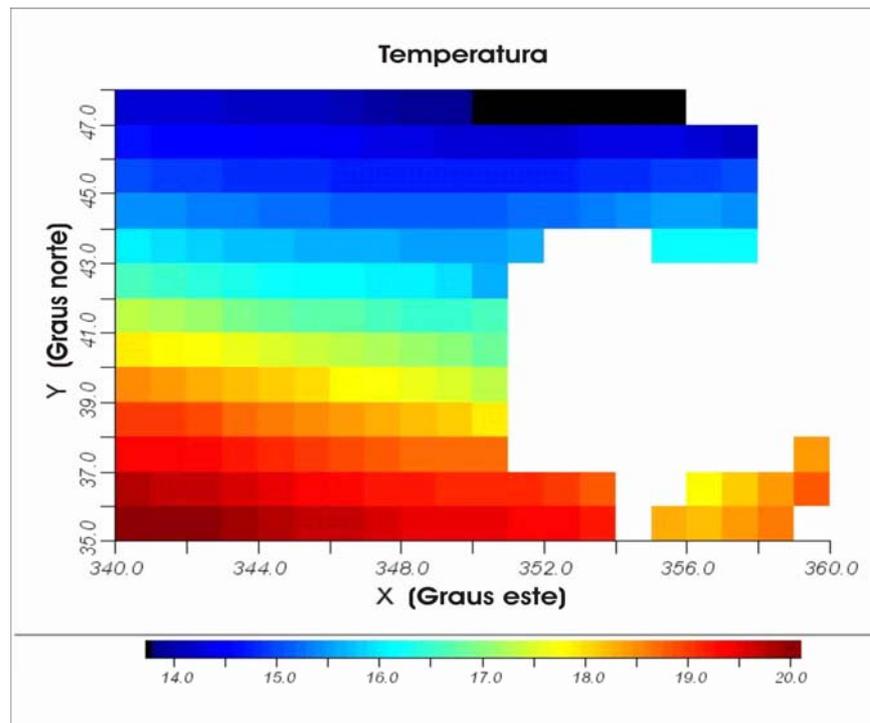


Figura 5.10 - Média mensal da temperatura (°C) de Novembro da base de dados *Levitus94* para o caso do N/T Prestige

As médias diárias das componentes u e v da velocidade do vento são retiradas da base de dados *QuickScat*. A **Figura 5.11** apresenta os dados de vento para o dia 14 de Novembro de 2002.

A variação da altura de maré é dada pelo modelo *SR95*. A **Figura 5.12** apresenta a variação da altura de maré para o período do dia 12 de Novembro a 12 de Dezembro de 2002.

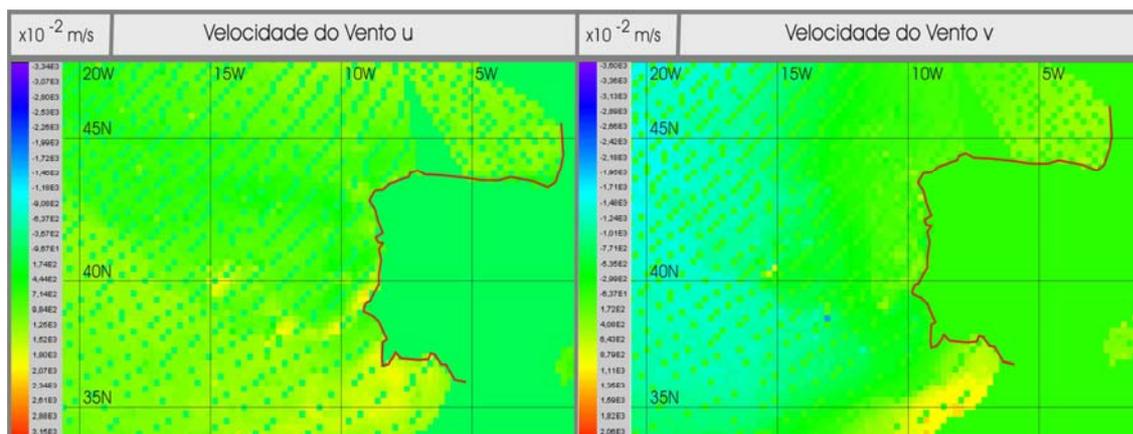


Figura 5.11 - Velocidades das componentes de vento do Quikscat para o caso do N/T Presige

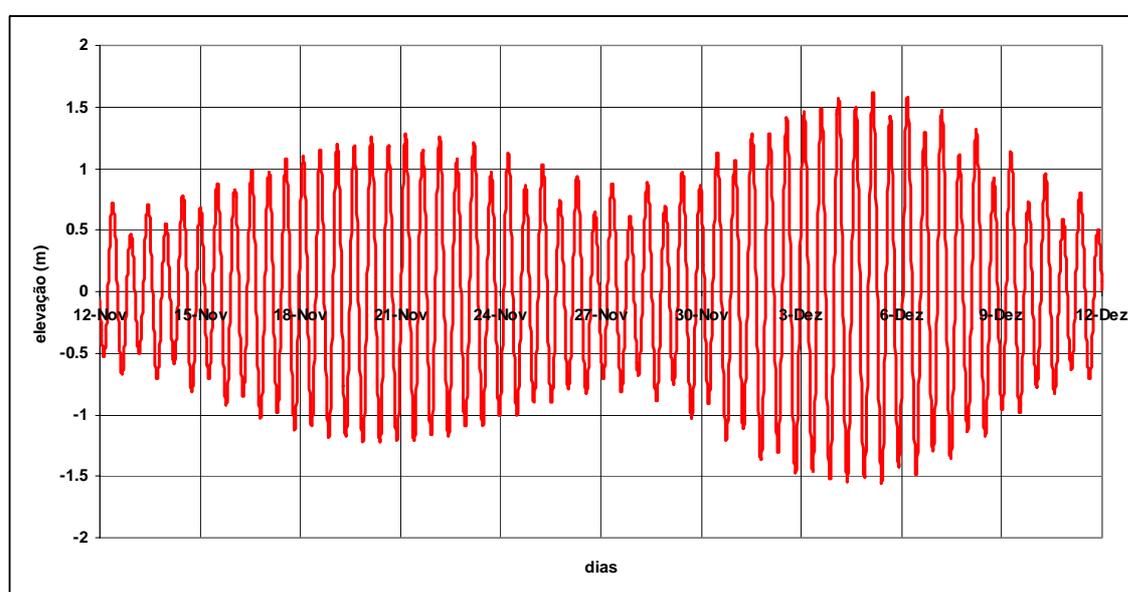


Figura 5.12 - Resultados do SR95 para o caso do N/T Presige

5.2. Modelação do Transporte

A modelação do transporte de manchas derramadas foi realizada com os programas GNOME e RMA4.

Nas simulações que serão seguidamente apresentadas apenas foi utilizado o vento como agente responsável pela deslocação do petróleo derramado. Apesar de o vento ser o principal responsável pelo deslocamento dos produtos petrolíferos derramados devido à sua acção sobre a camada superficial do oceano (Pinho *et al*, 2002; Daniel *et al*, 2003), em determinadas situações as correntes marinhas também têm algum efeito na deslocação (como por exemplo junto à costa). No entanto, neste estudo, apenas foi utilizado o vento como agente do deslocamento.

5.2.1. Modelo Lagrangeano – GNOME

5.2.1.1. Criação do modelo lagrangeano

A informação geográfica foi retirada da base de dados de linhas de costa GSHHS. Esta necessitou de ser transformada em um formato específico para o programa GNOME (formato *bn*).

Este formato define as zonas de terra e de água onde podem ocorrer os derrames. Uma vez que este modelo apenas utiliza informação relativa à camada superficial torna-se desnecessária a utilização dos dados de profundidade oceânica.

Para a definição dos campos de deslocamento, utilizaram-se os dados de vento extraídos da base de dados QuickScat. São disponibilizados dados de média diária para determinada localização. Os valores de u (eixo dos xx) e de v (eixo dos yy) são convertidos em direcção e velocidade de forma a serem inseridos no GNOME.

Apenas podem ser introduzidos os valores médios para determinado período de tempo a ser definido. O **Quadro 5.2** mostra os valores médios diários da direcção e intensidade do vento registados para a zona e o período do acidente.

Os dados de vento foram então inseridos no programa GNOME, juntamente com os dados geográficos relativos a zona do acidente.

Quadro 5.2 - Intensidade e direcção média do vento durante a ocorrência do acidente do N/T Prestige para a zona do acidente

| dia | vento | |
|-----------|--------------------|---------------------------|
| | média diária (m/s) | direcção média diária (°) |
| 13-Nov-02 | 12.95 | 195.13 |
| 14-Nov-02 | 14.13 | 304.83 |
| 15-Nov-02 | 12.62 | 301.16 |
| 16-Nov-02 | 15.90 | 290.40 |
| 17-Nov-02 | 12.49 | 229.03 |
| 18-Nov-02 | 9.55 | 188.79 |
| 19-Nov-02 | - * | - * |
| 20-Nov-02 | 9.26 | 285.79 |
| 21-Nov-02 | 18.40 | 359.56 |
| 22-Nov-02 | 11.18 | 194.93 |
| 23-Nov-02 | 15.87 | 349.50 |
| 24-Nov-02 | 9.27 | 316.27 |
| 25-Nov-02 | 12.33 | 246.43 |
| 26-Nov-02 | 7.63 | 291.62 |
| 27-Nov-02 | 25.10 | 229.20 |
| 28-Nov-02 | 14.60 | 180.71 |
| 29-Nov-02 | 8.40 | 344.82 |
| 30-Nov-02 | 5.65 | 207.38 |
| 1-Dez-02 | 20.86 | 184.40 |
| 2-Dez-02 | 11.26 | 321.56 |
| 3-Dez-02 | 10.08 | 213.75 |
| 4-Dez-02 | 9.37 | 327.74 |
| 5-Dez-02 | 10.42 | 253.67 |

* sem registo

5.2.1.2. Cenários simulados

No total foram consideradas como derramados 33000 *tons* de petróleo. Foi definido um valor do coeficiente de dispersão horizontal de $10^6 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$. O valor do coeficiente utilizado foi escolhido de acordo com a análise realizada no capítulo 4.

É de salientar a possibilidade do GNOME definir diferentes posições iniciais e finais para o derrame, o que possibilita definir com mais rigor o regime do derrame.

Foi definido com base na informação obtida do acidente, as condições do derrame, nomeadamente posições, quantidades, duração, etc. Desta forma definiu-se que o derrame ocorreu segundo a trajectória percorrida pelo Prestige até ao local de afundamento.

5.2.1.3. Análise de resultados

Procedeu-se a uma simulação compreendendo um período desde o dia 14 de Novembro até ao dia 30 de Novembro. Os resultados obtidos são apresentados na **Figura 5.13**.

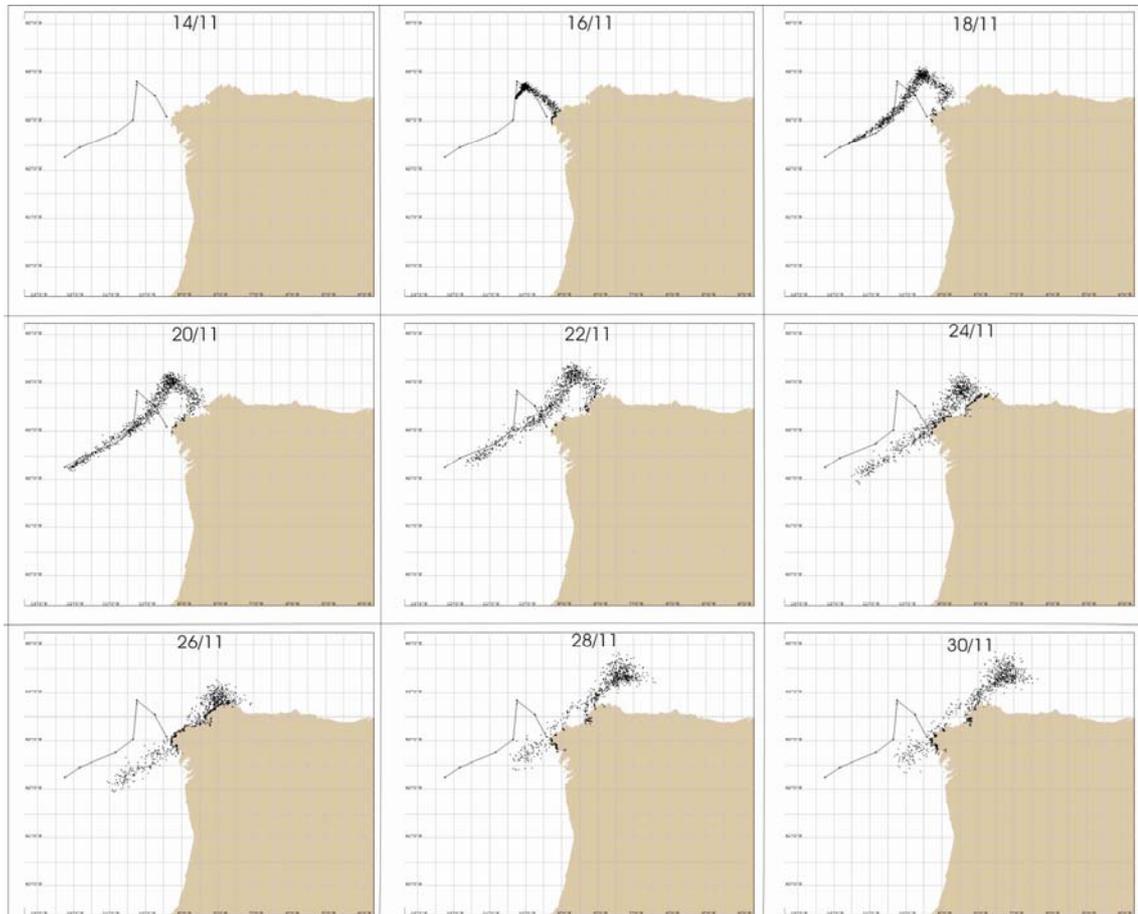


Figura 5.13 - Simulação do derrame do N/T Prestige com o programa GNOME

Uma comparação pode ser feita observando os resultados da simulação para o dia 17 de Novembro e imagens de satélite registadas nesse mesmo dia. Nessas imagens pode observar-se a tons mais escuros os contornos da mancha provocada pelo material derramado. Na comparação directa das duas imagens os padrões de forma da mancha assemelham-se bastante. Esta comparação pode ser observada na **Figura 5.14**. Nesta análise deve-se ter em conta que as imagens não estão no mesmo sistema referencial. A imagem de satélite apresenta-se como uma foto real tirada de uma determinada perspectiva, enquanto a simulação é feita numa projecção em coordenada geográficas.

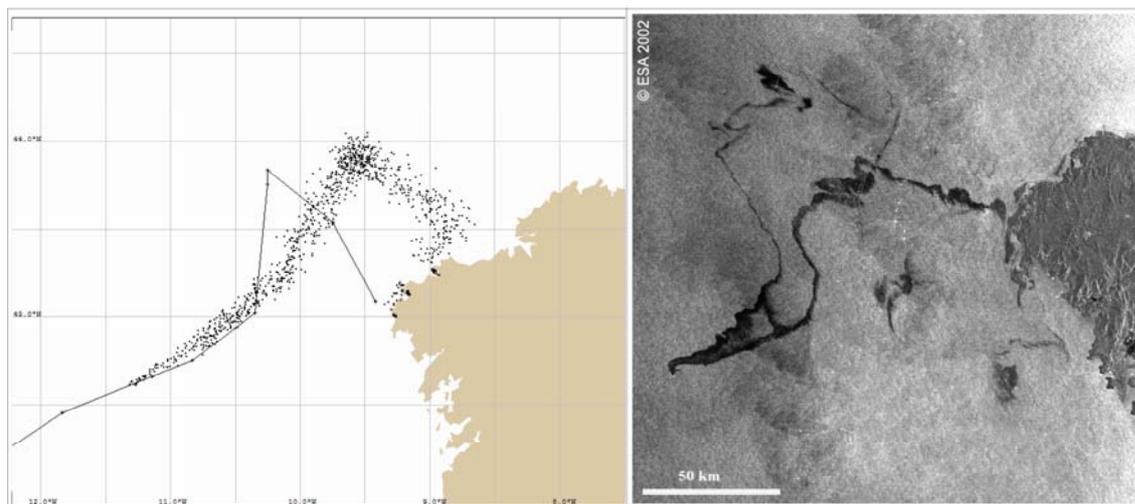


Figura 5.14 - Comparação da simulação do derrame com imagens de satélite para o dia 17 de Novembro

Desta forma, pode concluir-se que o derrame pôde ser simulado com uma margem de erro aceitável, tendo em conta apenas a velocidade e direcção do vento como o principal factor de transporte. O período de modelação foi bastante extenso (13 dias) sem qualquer limitação pelo tempo de cálculo. Desta forma, o GNOME mostra-se como um óptimo modelo de simulação de derrames petrolíferos. Este permite ainda a exportação dos resultados da simulação para ferramentas de SIG e permite a utilização de uma ferramenta de análise, o *GNOME Analyst* (a qual apenas está disponível para utilização comercial) para entre outros, determinar concentrações com base na distribuição de pontos (NOAA, 2004).

5.2.2. Modelo Euleriano – RMA4

5.2.2.1. Criação do modelo euleriano

O modelo euleriano RMA4 foi utilizado para simular o derrame do N/T Prestige.

A informação geográfica foi retirada da base de dados de linhas de costa GSHHS. De forma a facilitar a geração da malha de elementos finitos escolheu-se uma definição mais baixa das linhas de costa.

A malha de elementos finitos foi então gerada através da ferramenta de geração especificamente desenvolvida para tal.

A malha possui 3192 elementos, com uma área média de aproximadamente 160 km^2 por elemento e volume médio de cada elemento de $2.8 \times 10^6 \text{ m}^3$ (Figura 5.15).

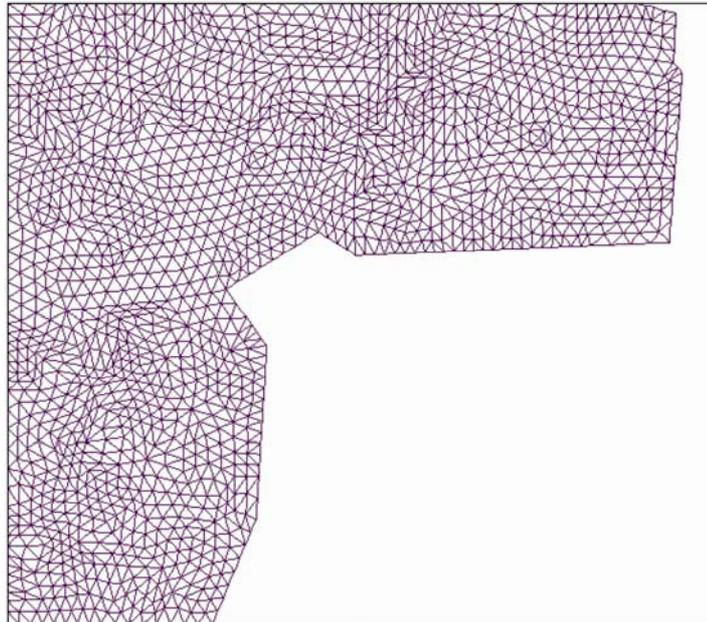


Figura 5.15 - Malha de elementos finitos utilizada na simulação do derrame do N/T Prestige

Dos dados extraídos da base de dados de vento QuikScat obtiveram-se os valores dos vectores u (eixo dos xx) e v (eixo dos yy) para os dias e o local seleccionado para a simulação.

O **Quadro 5.3** apresenta os valores dos vectores considerados e da sua contribuição para o deslocamento da mancha. Foi considerado um valor de 3,3% do valor de vento para o contributo para o deslocamento (MeteoGalicia, 2002).

Quadro 5.3 - Valores dos vectores de vento e de deslocação u e v

| dia | vento (m/s) | | movimento devido ao vento (0.33% de u) | |
|-----------|-------------|-------|--|----------|
| | u | v | u | v |
| 18-Nov-02 | 9.44 | 1.46 | 0.31152 | 0.04818 |
| 19-Nov-02 | -- * | -- * | -- * | -- * |
| 20-Nov-02 | -2.52 | 8.91 | -0.08316 | 0.29403 |
| 21-Nov-02 | 18.40 | -0.14 | 0.6072 | -0.00462 |
| 22-Nov-02 | 10.80 | 2.88 | 0.3564 | 0.09504 |
| 23-Nov-02 | 15.60 | -2.89 | 0.5148 | -0.09537 |
| 24-Nov-02 | 6.70 | -6.41 | 0.2211 | -0.21153 |
| 25-Nov-02 | 4.93 | 11.30 | 0.16269 | 0.3729 |
| 26-Nov-02 | -2.81 | 7.09 | -0.09273 | 0.23397 |
| 27-Nov-02 | 16.40 | 19.00 | 0.5412 | 0.627 |

* Sem registo

Assim, foram seleccionados 33 elementos como representativos da área onde se encontrava o material derramado no dia 19 (**Figura 5.16**). Considerando a quantidade total derramada (33000 ton) e o volume total dos elementos seleccionados ($9.31 \times 10^7 m^3$), considerou-se uma concentração inicial de cerca de 12 mg/l de fuel oil.

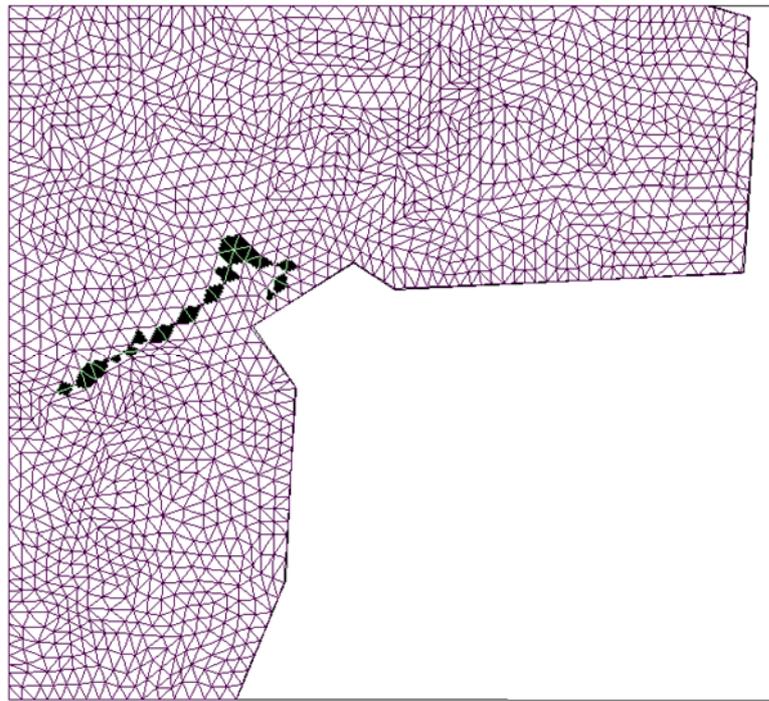


Figura 5.16 - Elementos seleccionados para a definição da concentração inicial

5.2.2.2. Análise de resultados

Os resultados obtidos da simulação anteriormente descrita podem ser visualizados na **Figura 5.17**.

A distribuição espacial da concentração de fuel oil pode ser observada através dos contornos em tons de cinzentos apresentados na figura.

Pode observar-se que aqui, ao contrário do que acontece no GNOME, onde a concentração é dada pela proximidade dos pontos, a concentração é apresentada directamente na simulação através das curvas de concentração (**Figura 5.18**)

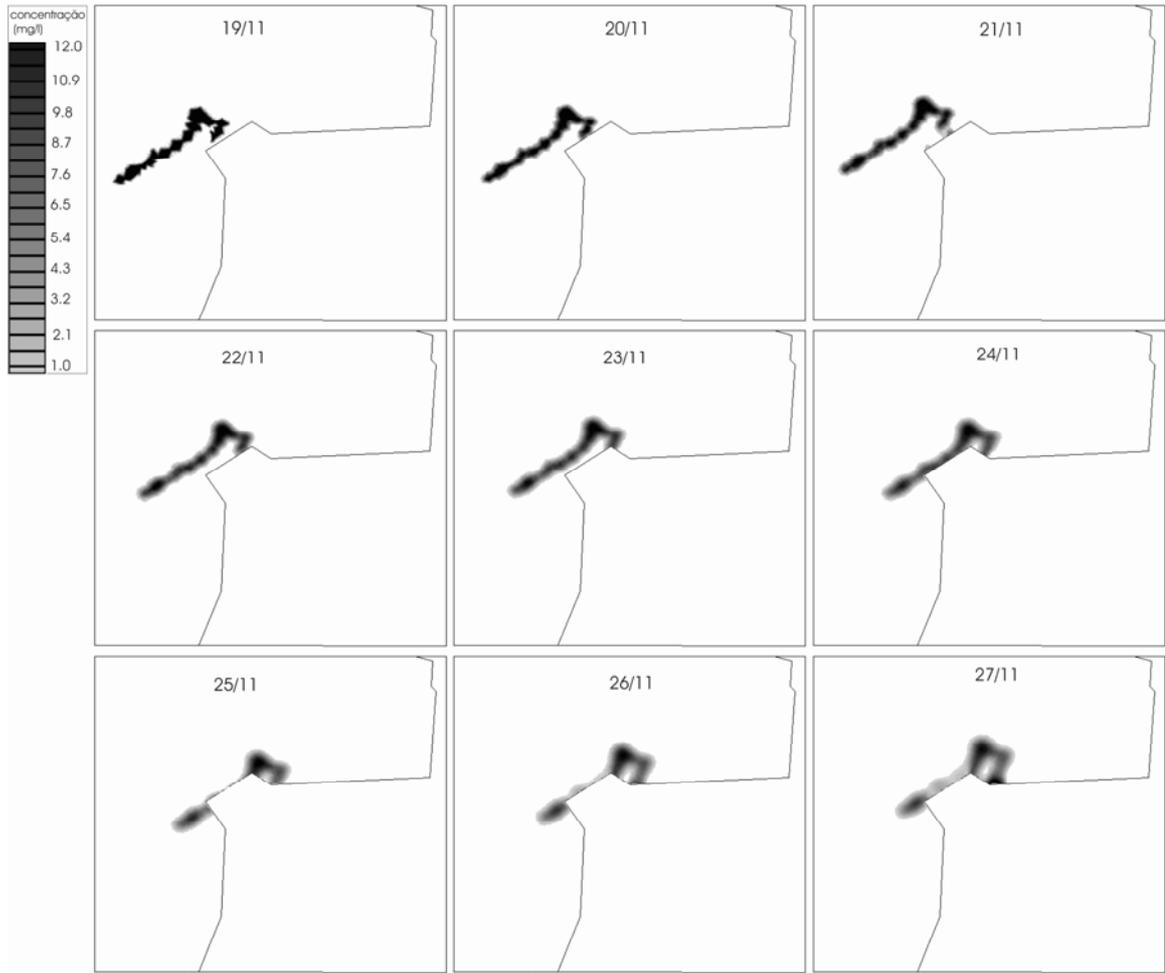


Figura 5.17 - Simulação do derrame do N/T Prestige com o programa RMA4

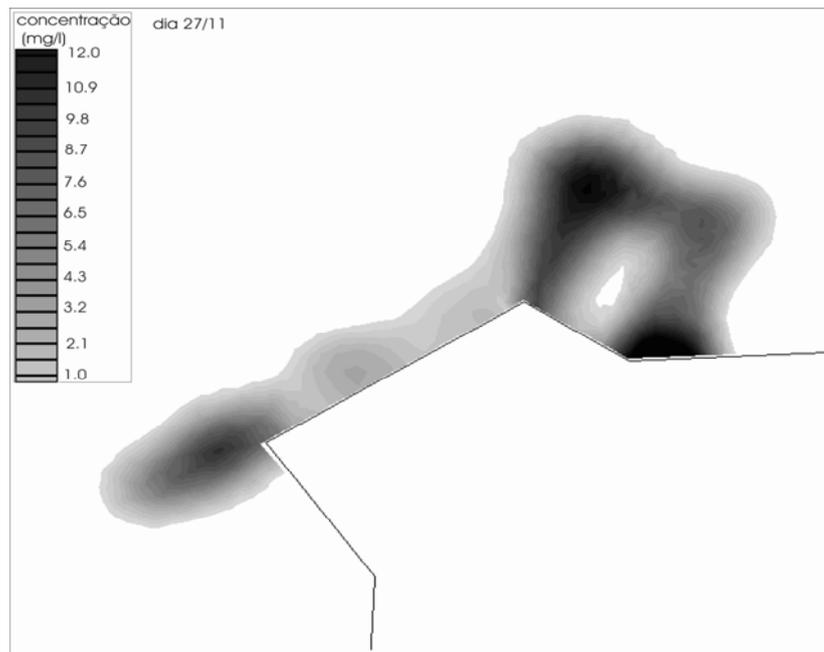


Figura 5.18 - Curvas de concentração do programa RMA4

5.2.3. Comparação dos resultados – GNOME e RMA4

De forma a realizar uma análise comparativa entre os resultados obtidos para os dois modelos, os resultados destes foram exportados para o SIG. Desta forma com a ferramenta *ArcView* foi possível analisa-los de uma forma mais sistemática.

A **Figura 5.19** mostra o resultado de 4 dias para a simulação do GNOME visualizada na ferramenta *ArcView*.

Aqui podem ser definidos de forma diferente os pontos que se encontram ainda na água, e os pontos que se encontram na praia (em contacto com a linha de costa)

A **Figura 5.20** mostra o resultado de 4 dias para a simulação do RMA4 visualizada na ferramenta *ArcView*.

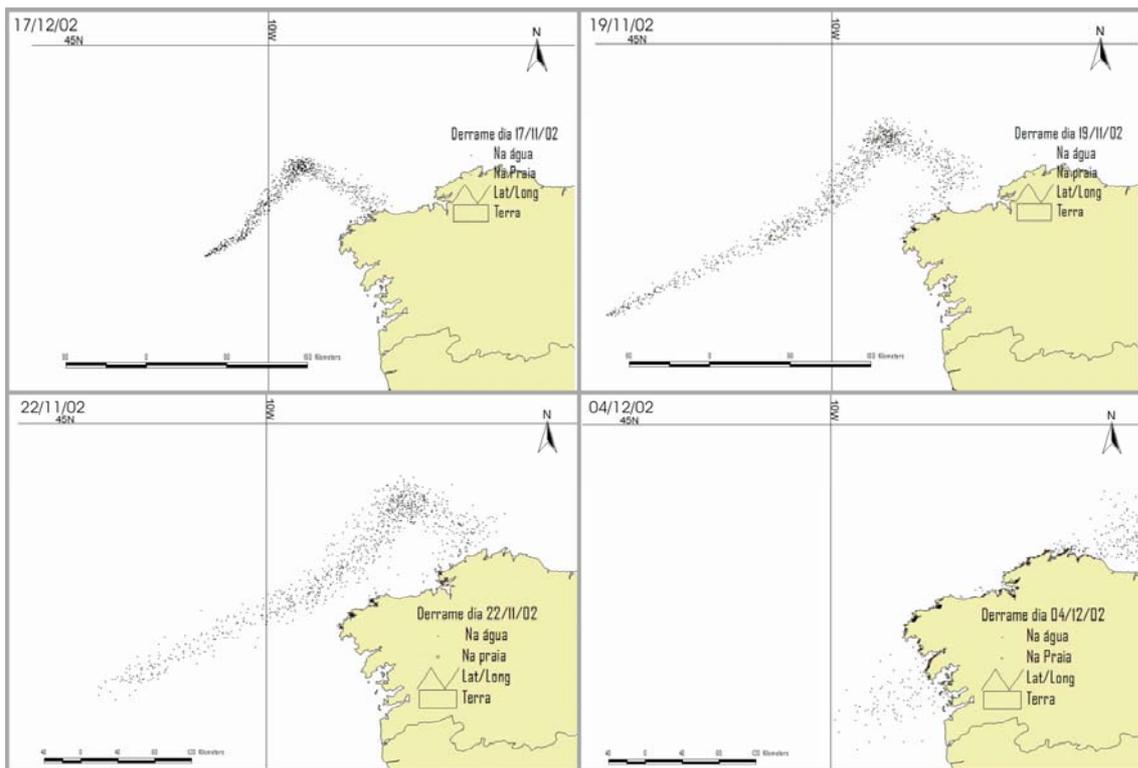


Figura 5.19 - Simulação do GNOME visualizado no ArcView

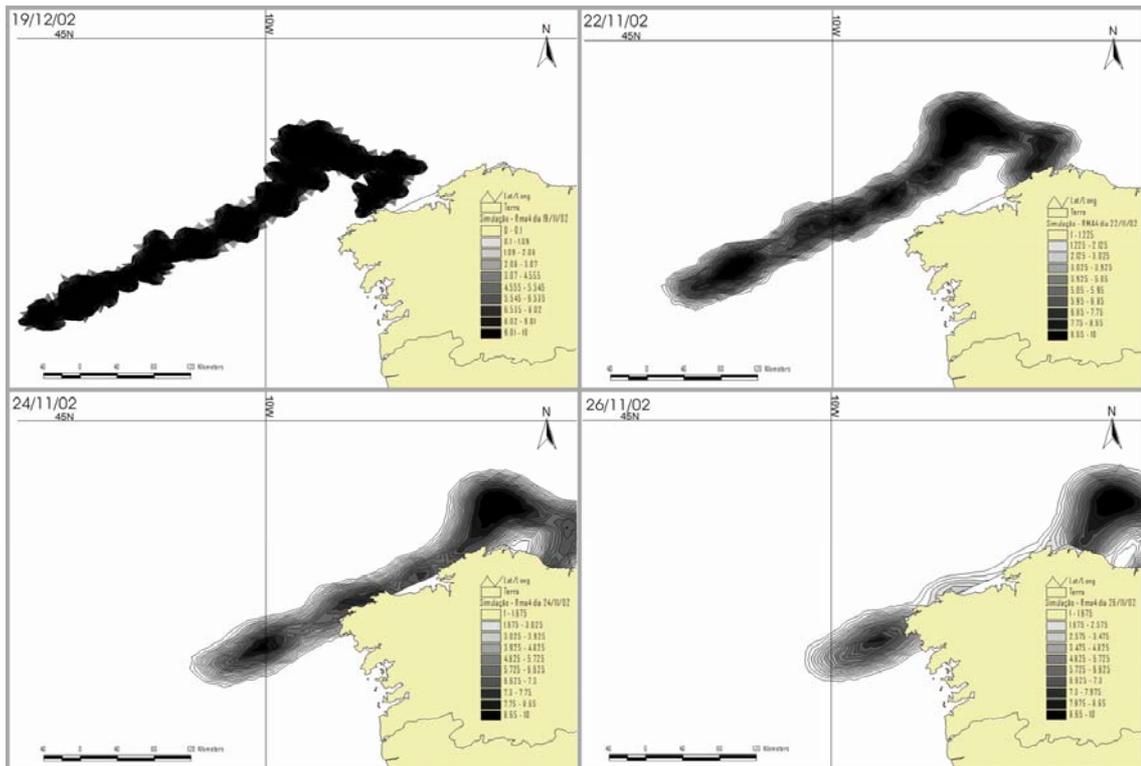


Figura 5.20 - Simulação do RMA4 visualizado no ArcView

Aqui os resultados obtidos também são representados por contornos representativos da distribuição espacial da concentração de fuel oil.

A ferramenta *ArcView* permite que sejam sobrepostos os resultados obtidos pelos dois modelos numa mesma vista.

A **Figura 5.21** apresenta na mesma vista os resultados dos dois modelos para o dia 22 de Novembro de 2002.

Pode-se observar que existe uma sobreposição dos resultados obtidos pelos dois modelos, o que pode indicar que os dois modelos estão próximos do mesmo resultado apesar de apresentarem esquemas de cálculo diferentes.

A integração dos resultados do modelo no SIG permite ainda realizar comparações com dados observados, tal como se verifica na **Figura 5.21**.

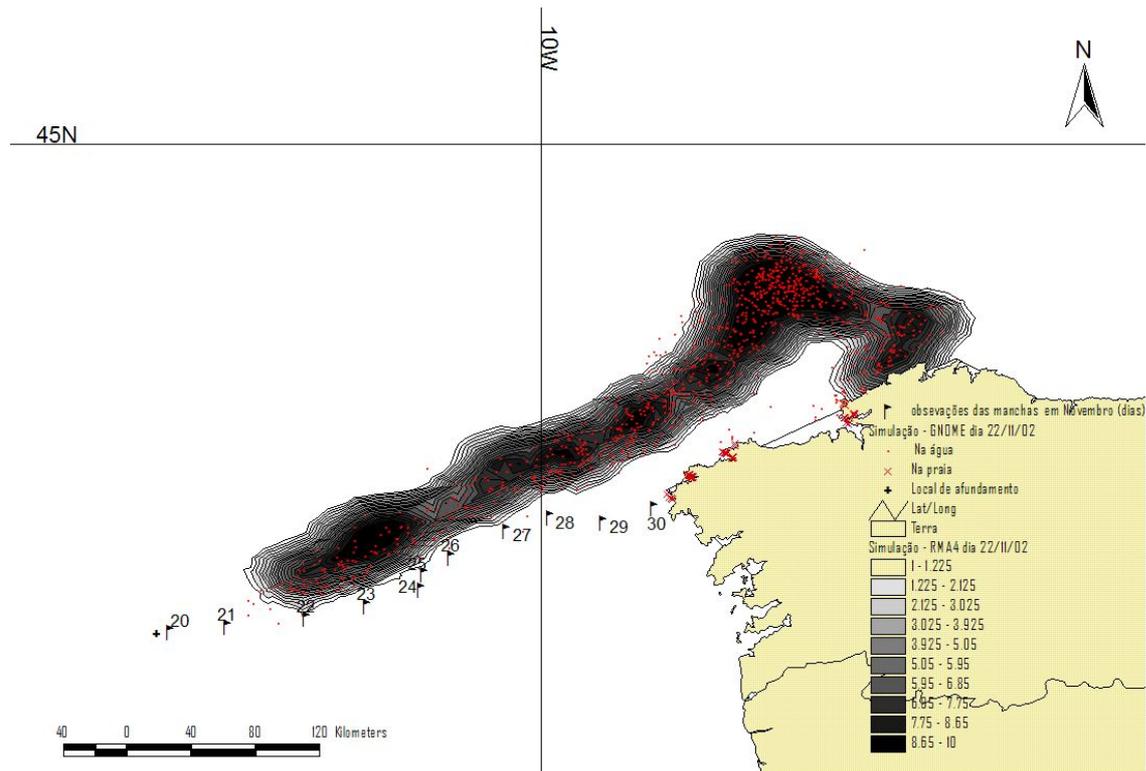


Figura 5.21 - Comparação das simulações dos dois modelos de transporte com os dados observados

5.3. Modelação dos processos de degradação

Com base nos modelos apresentados anteriormente procurou-se simular os principais processos de degradação a que o material derramado pelo N/T Prestige.

5.3.1. Degradação físico-química

Para a simulação destes fenómenos, utilizou-se os modelos ADIOS2 e OILDEGRAD.

No modelo ADIOS2, os dados relativos à característica do produto derramado encontram-se na base de dados interna do programa, tendo sido apenas fornecido as condições ambientais e dados do acidente. O tipo de óleo escolhido da biblioteca interna do programa foi o Fuel oil n.º 6 com as características apresentadas no **Quadro 5.4**.

Quadro 5.4 - Dados do fuel oil nº.6 da base de dados interna do ADIOS2

| | |
|-----------------------------|--------------------------------|
| Tipo de óleo | Fuel Oil nº.6 |
| Gravidade API | 12.3 |
| Densidade | 0.983 g/cm ³ a 15°C |
| Viscosidade | 1381.9 cS a 15°C |
| Ponto de escorrência | 15 °C |
| Ponto de ignição | 98 °C |

A **Figura 5.22** mostra os resultados da simulação relativo à degradação global do fuel oil nº 6.

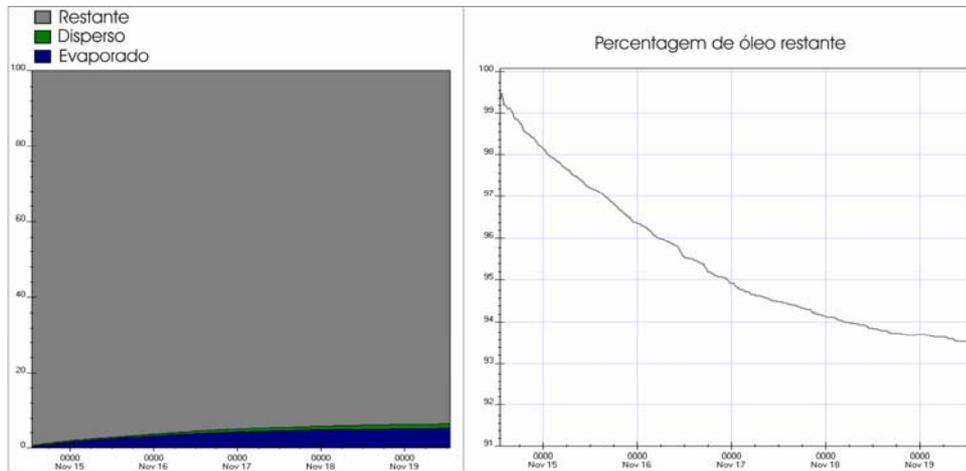


Figura 5.22 - Resultados do ADIOS2 para a degradação do fuel oil nº 6

A **Figura 5.23** mostra os resultados da simulação relativo à evolução das características de densidade e viscosidade do fuel oil nº 6.

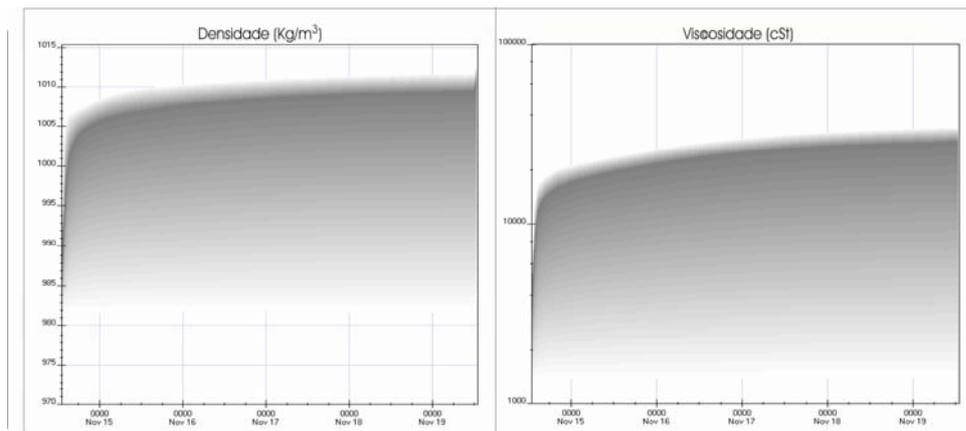


Figura 5.23 - Resultados do ADIOS2 para a densidade e viscosidade do fuel oil nº 6

A **Figura 5.24** mostra os resultados da simulação relativa à evolução do processo de emulsificação, evaporação e dispersão vertical do fuel oil nº 6.

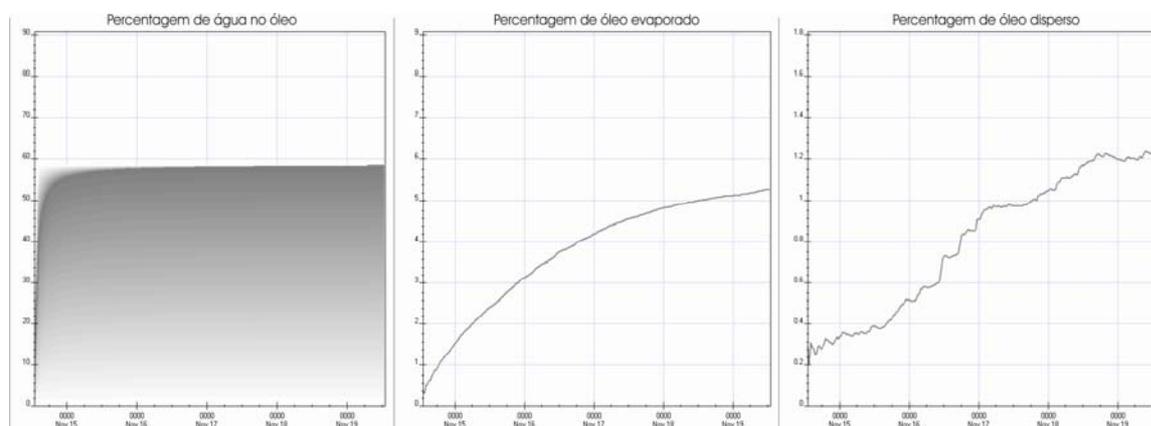


Figura 5.24 - Resultados do ADIOS2 para a emulsificação, evaporação e dispersão vertical do óleo

Os resultados obtidos por este modelo podem ser agora comparados com os obtidos pelo modelo OilDegrad.

O **Quadro 5.5** mostra os parâmetros utilizados na modelação do derrame do Prestige no modelo OilDegrad.

Quadro 5.5 - Parâmetros utilizados no modelo OILDEGRAD

| Parâmetros | Valores | Unidades |
|---------------------------|------------|-----------------------|
| Viscosidade | 48 | cP (15°C) |
| Densidade | 0.993 | g/ml |
| Fracção inic. evaporada | 0 | |
| Fracção inic. de água | 0 | |
| Fracção final de água | 0.57 | |
| Fracção inic. dispersa | 0 | |
| Fracção inic. que retorna | 0 | |
| Área inic. | 332326.284 | m ² |
| Volume inic. | 332326.284 | m ³ |
| Vel. média do vento | 8 | m/s |
| Temperatura | 288 | °K |
| T0 | 465.6 | °K |
| TG | 998 | °K |
| A | 16 | |
| B | 13 | |
| Tensão superficial | 39.82 | Dyne cm ⁻¹ |
| Constante K1 | 150 | s ⁻¹ |
| Constante C4 | 10 | |

Os resultados da evolução do volume, área e espessura da mancha podem ser observados na **Figura 5.25**.

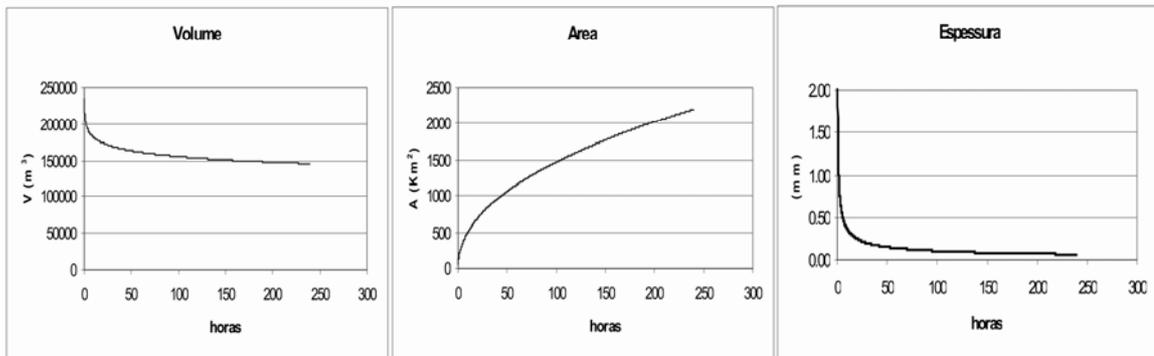


Figura 5.25 - Resultados do OilDegrad para a evolução do volume, área e espessura da mancha

Os resultados da evolução da viscosidade e densidade podem ser observados na **Figura 5.26**.

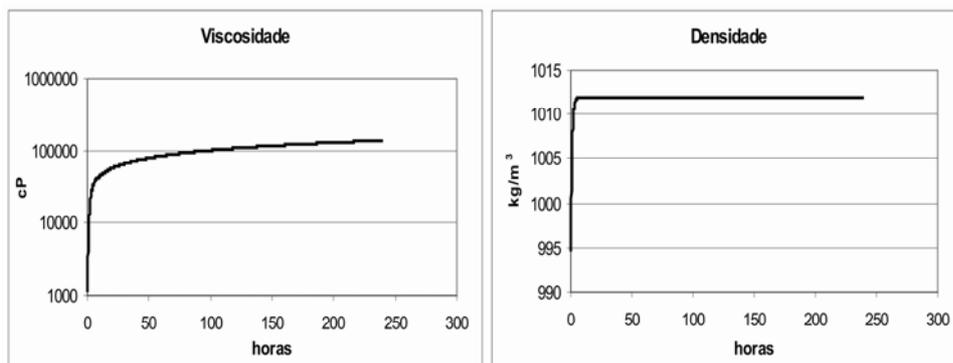


Figura 5.26 - Resultados do OilDegrad para a evolução viscosidade e densidade

Os resultados da fracção evaporada, emulsificação e perdas por dispersão podem ser observados na **Figura 5.27**.

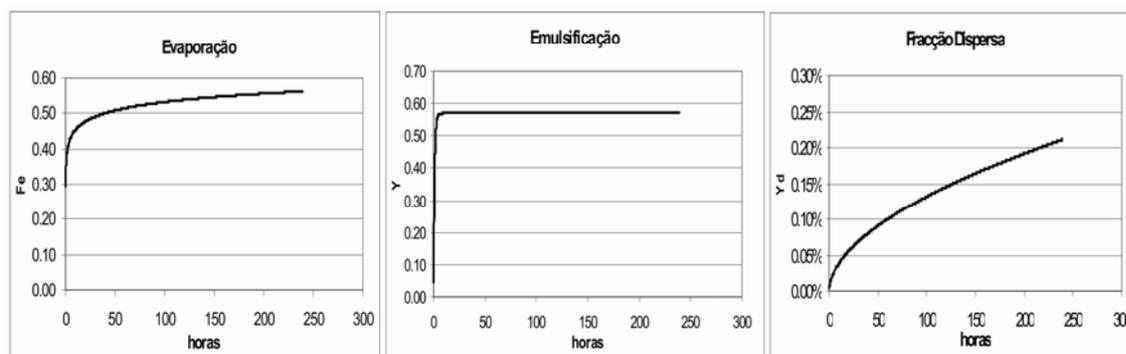


Figura 5.27 - Resultados do OilDegrad para a fracção evaporada, emulsificação e perdas por dispersão

Sendo o ADIOS2 um modelo muito utilizado em todo o mundo para a simulação de derrames petrolíferos (NOAA, 2003c), pode-se considerar este modelo como um modelo válido, dependendo a sua precisão da qualidade dos bases de dados a serem introduzidos neste. Desta forma, e comparando os resultados do modelo OILDEGRAD com este, pode-se verificar resultados bastante similares. Este facto leva a acreditar que o modelo OILDEGRAD é igualmente capaz de descrever o comportamento físico-químico dos hidrocarbonetos derramados.

5.3.2. Degradação biológica

A simulação dos processos de biodegradação dos hidrocarbonetos presentes no produto derramado foi efectuada com recurso ao modelo BIODEGRAD. Para a simulação destes processos foi utilizado o hidrocarboneto naftaleno. Este é o hidrocarboneto aromático policíclico (HAP) mais abundante presente no óleo derramado (IFP, 2003).

Segundo os dados obtidos (IFP, 2003), foram encontrados na água 0.078 mg/l de naftaleno proveniente do derrame. Esta quantidade é proveniente da fracção que se dispersa da mancha de produto derramado. Uma vez que este HAP se encontra naturalmente em fase sólida sob a forma de cristais, a sua biodegradação depende da sua solubilização em água.

Os parâmetros utilizados para a simulação, encontram-se apresentados no **Quadro 5.6**. Os parâmetros cinéticos utilizados são provenientes de estudos prévios para microrganismos que degradam este tipo de substrato (Gomes *et al*, 2003b).

Quadro 5.6 - Parâmetros utilizados no modelo BIODEGRAD

| Parâmetros de simulação | Valores |
|-------------------------------------|---------|
| C biodisponível in (mg/L) | 0.078 |
| Biomassa in (mg/L) | 10 |
| C fase sólida in (mg/L) | 0.078 |
| C total do hidrocarboneto in (mg/L) | 0.078 |
| Ks (mg/L) | 0.25 |
| μ_m (h ⁻¹) | 0.24 |
| Y (–) | 1.3 |
| C max de solubilidade | 1.12 |
| K | 0.001 |
| Nº de intervalos de tempo | 10000 |
| Δt | 0.5 |

Os resultados da simulação para 500 horas podem ser observados na **Figura 5.28**.

O resultado da evolução do naftaleno biodisponível pode ser melhor observado na **Figura 5.29** em comparação com o naftaleno em fase sólida.

Assim este modelo permite-nos avaliar o efeito da biodegradação na evolução das características químicas de várias componentes dos produtos petrolíferos, permitindo ainda planear estratégias de biorremediação dos hidrocarbonetos derramados.

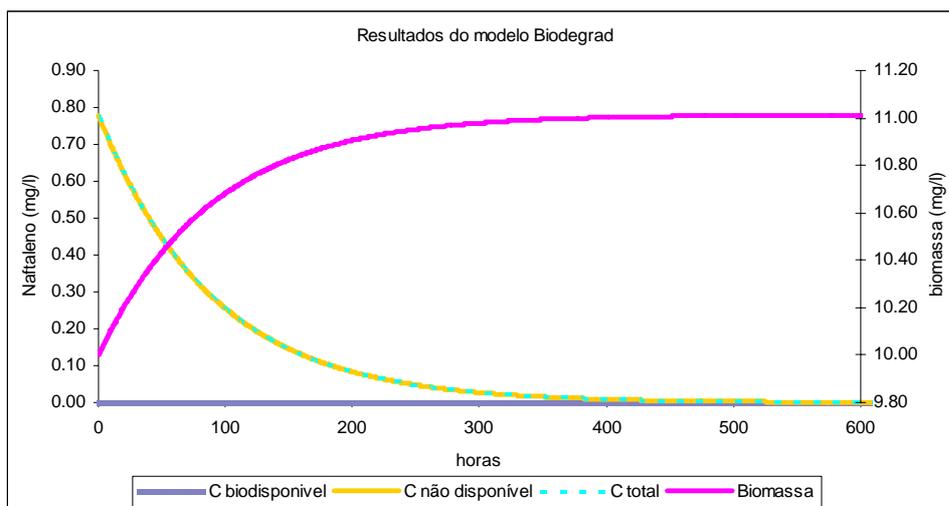


Figura 5.28 - Resultados do modelo BIODEGRAD para o Naftaleno

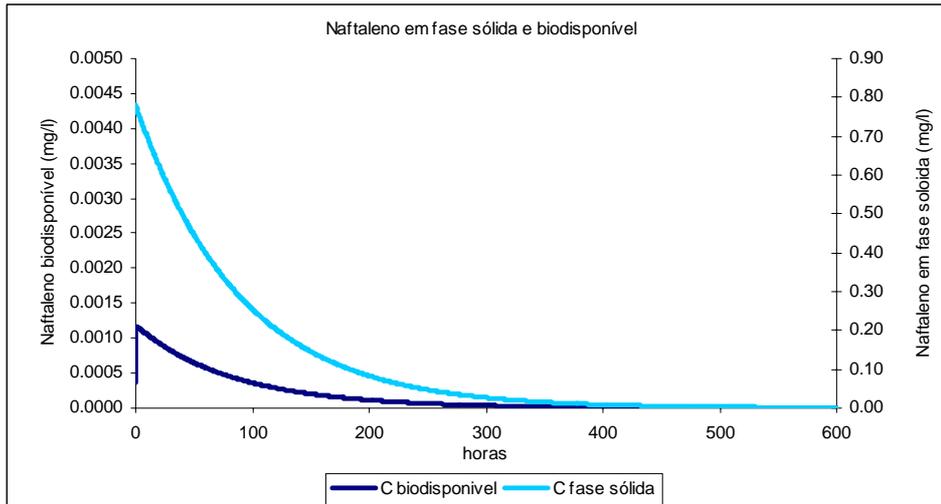


Figura 5.29 - Resultados do modelo BIODEGRAD para o Naftaleno biodisponível e em fase sólida

6. CONCLUSÕES E DESENVOLVIMENTOS FUTUROS

6.1. Conclusões

A construção do SIMDHAM foi realizada de forma a otimizar a integração das suas componentes. As bases de dados foram agrupadas de acordo com o conteúdo temático da informação, nomeadamente, dados geográficos, características ambientais e dados do derrame, tal como descrito no capítulo 3. Os diferentes tipos de dados foram obtidos de fontes acessíveis *on-line*.

Devido à quantidade e complexidade de informação necessária para a gestão de derrames petrolíferos no mar, torna-se evidente, a necessidade de sistematização dessa informação. Os dados necessários no estudo ou acompanhamento de acidentes encontram-se em diferentes formatos obrigando a um tratamento adequado para a sua utilização, necessitando por isso de serem de certa forma uniformizadas de forma a poderem ser tratadas num determinado sistema de informação. O SIMDHAM, através das suas diversas ferramentas de processamento, permite realizar algumas destas transformações. No entanto, ainda subsiste a necessidade da criação de algumas ferramentas adicionais que possibilitem uma melhor manipulação destas informações. Apesar destas limitações o sistema criado apresentou-se eficaz na recolha, processamento e visualização da informação.

No capítulo 3 foram ainda apresentados os fluxos de informação entre as diversas componentes do SIMDHAM. A definição deste fluxo de informação permitiu uma melhor compreensão da utilização da informação adquirida e gerada no sistema.

Relativamente aos modelos de transporte de massa integrados no SIMDHAM (GNOME e RMA4), ambos se mostraram úteis na análise de situações de derrames petrolíferos. O RMA4 apresentou como principal limitação face ao GNOME, o seu tempo de cálculo muito superior, resultante claramente da utilização de um esquema de cálculo euleriano muito mais complexo do que o lagrangeano utilizado pelo GNOME. A utilização do RMA4, para a simulação de derrames de produtos petrolíferos, mostra-se como uma utilização inovadora de modelos eulerianos na simulação deste tipo de situações.

As estratégias utilizadas, para ultrapassar os problemas de considerar uma concentração homogénea no plano vertical, passaram por definir uma profundidade na malha de elementos finitos, que no caso apresentado foi de 1 *m*.

Desta forma, limitou-se a dispersão no plano vertical dos hidrocarbonetos, para uma profundidade de 1 *m*, não permitindo assim que estes se dispersassem verticalmente. Os resultados em concentração, apresentados pelo modelo, podem ser transformados em espessura da mancha, tal como apresentado no capítulo 4.

Ambos os modelos apresentaram resultados muito semelhantes nas simulações. É de referir ainda que um bom resultado do modelo euleriano depende da resolução da malha de elementos finitos e do valor do coeficiente de dispersão.

Os modelos de degradação físico-química e de degradação biológica utilizados mostraram-se igualmente válidos na simulação dos processos naturais ocorrentes nas situações de derrames petrolíferos. Em comparação com o modelo ADIOS2, um modelo já bastante utilizado e validado, o modelo OILDEGRAD implementado apresentou resultados muito semelhantes. O modelo BIODEGRAD também se mostra eficiente, como pode ser constatado pelos resultados obtidos através das comparações realizadas com dados obtidos com trabalhos experimentais (Capítulo 4). Este modelo tem a particularidade de ter em consideração para a biodegradação, a limitação de transferência de massa dos hidrocarbonetos para o meio líquido, descrevendo assim de uma forma mais eficaz os processos que ocorrem no ambiente.

O caso do derrame do *N/T Prestige* serviu para comprovar a utilidade do sistema de informação criado. O cruzamento de informação utilizando um SIG permite concluir que este sistema se apresenta como uma mais valia na gestão de derrames.

6.2. Desenvolvimentos Futuros

Ficaram, no entanto, por aprofundar alguns aspectos do sistema de informação criado.

Desde logo, pode referir-se a necessidade de uma maior uniformização da informação no sistema. Torna-se necessário desenvolver ferramentas adicionais de processamento que sejam capazes de transformar as informações de base noutros formatos que possam ser directamente utilizáveis pelos modelos de simulação.

A limitação do tempo de desenvolvimento do trabalho não permitiu igualmente a utilização de resultados dos modelos hidrodinâmicos para as simulações do transporte dos produtos petrolíferos derramados (quer RMA2, quer POM). No entanto, considerando-se unicamente a acção do vento obtiveram-se igualmente bons resultados. A integração dos modelos hidrodinâmicos poderá permitir uma melhoria nos resultados alcançados com os modelos de transporte.

Um dos principais pontos a ser desenvolvido é a criação de uma interface de acesso e gestão de toda a informação e modelos existentes no sistema. Esta interface iria permitir uma melhoria significativa ao nível da operacionalidade, facilitando assim o seu manuseamento pelo utilizador final.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bobra, M. e Callagham, S., (1990) *A Catalogue of Crude Oil and Oil Products Properties*, Consultchem, Environmental Emergency Manuscript Report Number EE-125, Environment Canada, Ottawa, Ontario, Canada.
- Bobra, M., (1991) *Water-in-Oil Emulsification: A Physicochemical Study*, Proceedings of the 1991 International Oil Spill Conference, Consultchem, Ottawa, Ontario, Canada.
- Bobra, M., (1992a) *A Study of the Evaporation of Petroleum Oils*, Consultchem, Environmental Emergency Manuscript Report Number EE-135, Environment Canada, Ottawa, Ontario, Canada.
- Bobra, M., (1992b) *Solubility Behavior of Petroleum Oils in Water*, Consultchem, Environmental Emergency Manuscript Report Number EE- 130, Environment Canada, Ottawa, Ontario, Canada.
- Bosma T., Middeldorp P., Schraa G., Zehnder A., (1997) *Mass Transfer Limitation of Biotransformation: Quantifying Bioavailability*. Environmental Science and Technology, 31, p. 248-252
- Buchanan, I. e Hurford, N., (1988) *Methods for Predicting the Physical Changes in Oil Spilt at Sea*. Crude Chem. Pollut., 4(4), p. 311-328.
- Carval, T., (2002) *Argo Data Management User Manual - Version 1.0*, ref: ar-um-02-01, IFREMER
- CCMM (2003) *Información sobre o vertido provocado polo petroleiro "PRESTIGE"*, Centro de Contol do Medio Mariño, Xunta de Galicia – (www.ccmm-prestige.cesga.es).
- CEDRE (2003) *Centre de Documentacion de Recherche et d'Expérimentation sur les Pollution Accidentelles des Eaux - CEDRE* – (www.le-cedre.fr)
- Chapra, S., (1997) *Surface Water-Quality Modeling*, McGraw-Hill int.
- Chau, A. e Mackay, D., (1988) *A Study of Oil Dispersion: The Role of Mixing and Weathering*, Environmental Emergency Manuscript Report Number EE-104, Environ. Canada, Ottawa, Ontario, Canada.
- Clark, B., Parsons, J., Yen, C., Ahier, B., Alexander, J., Mackay, D., (1986) *A Study of Factors Influencing Oil Submergence*, Emergency Manuscript Report Number EE-90, Environment Canada, Ottawa, Ontario, Canada.

- Conkright, M., Locarnini, R., Garcia, H., O'Brien, T., Boyer, T., Stephens, C., Antonov, J., (2002) *World Ocean Atlas 2001: Objective Analyses, Data Statistics, and Figures, CD-ROM Documentation*. National Oceanographic Data Center, Silver Spring, MD, 17 pp.
- Costa, M. e Carmo, J., (1999) *Evolução de Hidrocarbonetos Derramados em Zonas Costeiras e Estuarinas*. IV SILUSBA, Coimbra, Portugal.
- Daniel, P., Marty, F., Josse P., (2003) *Improvement of drift calculation in MOTHY operational oil spill prediction system*, International Oil Spill Conference 2003.
- ECMWF (2003) *European Centre for Medium-Range Weather Forecasts – ECMWF* - (www.ecmwf.int).
- EMS (2004) *Surface Water Modelling System*, EMS-i - (www.ems-i.com/SMS/SMS_Overview/sms_overview.html)
- ESRI (1996) *Using ArcView GIS*, Environmental Systems Research Institute, Inc., USA.
- Fingas, M., (1999) *Fieldhouse Water in Oil Emulsions: Results of Formation Studies and Application to Oil Spill Modelling*. Spill Science and Technology Bulletin Vol. 5 No 1 pp 81-91,1999.
- Fingas, M., (2001) *The Basics of Oils Spill Cleanup* - Second Edition. Lewis Publishers.
- Fratantoni, D. M. (2001) *North Atlantic surface circulation during the 1990's observed with satellite-tracked drifters*. Journal of Geophysical Research, Vol. 196, No. C10, P. 22067-22093.
- Gomes R., Pinho J., Vieira J., Carmo J., (2003a) *Sistema de Informação para a Modelação Matemática de Derrames Petrolíferos em Zonas Costeiras. Aplicação ao Derrame do N/T Prestige*. II Congresso sobre Planeamento e Gestão das Zonas Costeiras dos Países de Expressão Portuguesa. Recife, Brasil
- Gomes R., Nogueira R., Rodrigues A., Brito A., Pinho J., (2003b) *Modelação dos Processo de biodegradação de Hidrocarbonetos (HAP's) em Derrames Petrolíferos*. X Congresso Nacional de Biotecnologia – Biotec 2003, Lisboa
- Grimberg S., Stringfellow W., Aitken M., (1996) *Quantifying the biodegradation of Phenanthrene by Pseudomonas stutzeri P16 in the presence of Nonionic Surfactant*. Applied and Environmental Microbiology, Vol. 62 No. 7, p. 2387-2392

- Hayes, M., Hoff, R., Michel, J. Scholz, D., Shigenaka, G., (1992) *An Introduction to Coastal Habitats and Biological Resources for Oil Spill Response*, Report No.HMRAD 92-4, Hazard Material Response and Assessment Division, National Oceanic and Atmospheric Administration, Seattle, Washington.
- HAZMAT (2004) *Historical Incidents Search Page* – Hazard Materials Response Division — (spills.incidentnews.gov).
- Hoffman, D. , Rattner, B., Burton, G., Cairns, J., (2003) *Handbook of Ecotoxicology* - Second Edition, Lewis Publishers.
- IFP (2004) *Caractérisation du fioul “Prestige”*– Institute Français du Petrole – (<http://www.ifp.fr/IFP/fr/actualites/fs01.htm#5>)
- IFP (2003) *Caractérisation et comportement dans l'environnement du fioul “PRESTIGE”* - Institute Français du Petrole, França.
- Jakobsson, M., Cherkis, N., Woodward, J., Macnab, R., Coakley, B., (2000) *New grid of Arctic bathymetry aids scientists and mapmakers*; Eos, Transactions, American Geophysical Union, v.81, no.9, p. 89,93,96.
- JPL, (1996) *A Collection of Global Ocean Tide Models*, Jet Propulsion Laboratory, Physical Oceanography Distributed Active Archive Center Pasadena, CA.
- JPL, (2004a) *Topex/Poseidon – Jason-1 – Oceanic Surface Topography*, Jet Propulsion Laboratory, (topex.jpl.nasa.gov/missions/)
- JPL, (2004b) *Winds – Mesuring winds from space*, Jet Propulsion Laboratory, (winds.jpl.nasa.gov/missions/quickscat)
- Levitus, S. e Boyer, T., (1994) *World Ocean Atlas 1994 Volume 4: Temperature*. NOAA Atlas NESDIS 4, U.S. Department of Commerce, Washington, D.C.
- Levitus, S., R. Burgett, Boyer, T., (1994) *World Ocean Atlas 1994 Volume 3: Salinity*. NOAA Atlas NESDIS 4, U.S. Department of Commerce, Washington, D.C.
- Mackay, D., Buist, I., Mascarenhas, R. e Petersen, S., (1980) *Oil Spill Processes and Models*. Environmental Protection Service, Canada, report EE-8.
- Matos, J.L., (2001) *Fundamentos de Informação Geográfica*. LIDEL Edições Técnicas Lda.
- Mellor, G., (1998) *Users Guide for a Three-Dimensional, Primitive Equation, Numerical Ocean Model*, Princeton University, Princeton, USA.

MeteoGalicía, (2002) *Traxectoria dunha partícula na superficie do mar tendo en conta soamente o efecto do vento* – MeteoGalicía, Consellería de Medio Ambiente– (meteo.usc.es)

Nirmalakhandan, N., (2002) *Modeling Tools for Environmental Engineers and Scientists*, CRC Press LLC.

NOAA (2003a) *World Ocean Atlas Series*, National Oceanographic Data Center, NOAA - (www.nodc.noaa.gov/OC5/indprod.html)

NOAA (2003b) *Surface of the Earth, 2 minute color relief images*, National Oceanographic Data Center, NOAA - (<http://www.ngdc.noaa.gov/mgg/image/2minrelief.html>)

NOAA (2003c) *Software for Oil Spill Responders and Planners* - National Oceanographic Data Center, NOAA - (www.response.restoration.noaa.gov/software/software.html)

NOAA (2004) *GNOME 1.2.4 – General NOAA Oil Modeling Environment ; HAZMAT division* – NOAA - USA

Pinho J.L.S., (2001) *Aplicação de Modelação Matemática ao Estudo da Hidrodinâmica e da Qualidade da Água em Zonas Costeiras*, Tese de Doutoramento, Universidade do Minho, Portugal.

Pinho, J.L.S., Antunes do Carmo, J.S. e Vieira, J.M.P. (2002) *Numerical Modelling of Oil Spills in Coastal Zones. A Case Study*. Actas do Oil Spill 2002, Rhodes, Grécia.

Rodrigues A.C., (2003) *Contaminação por Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (HAP's): Estudos sobre os mecanismos de degradação e aplicação a Reactores Descontínuos Sequenciais com Biofilme (SBBR)*. Tese de Doutoramento em Engenharia Química e Biológica; Universidade do Minho.

Smith, W. e Sandwell, D. (1997) *Global Sea Floor Topography from Satellite Altimetry and Ship Depth Soundings*, Science Magazine, vol. 277, issue 5334.

Wang, Z., Hollebone B., Fingas M., Fieldhouse B., Sigouin L., Landriault M., Smith P., Noonan J., and Thouin G., (2003) *Characteristics of Spilled Oils, Fuels, and Petroleum Products: 1. Composition and Properties of Selected Oils*, Emergencies Science and Technology Division Environmental Technology Centre Environment Canada EPA/600/R-03/072.

WES-HL, (1996) *Users Guide to RMA2 Version 4.3*, US Army Corps of Engineers – Waterways Experiment Station Hydraulics Laboratory, Vicksburg, USA.

WES-HL, (2000) *Users Guide to RMA4 Version 4.5*, US Army Corps of Engineers – Waterways Experiment Station Hydraulics Laboratory, Vicksburg, USA.

Wessel, P. e Smith, W. (1996) *A Global Self-consistent, Hierarchical, High-resolution Shoreline Database*, J. Geophys. Res., 101, p. 8741-8743.

Wick L., Colangelo T., Harms H., (2001) *Kinetics of Mass Transfer Limited Bacterial Growth on Solid PAHs*. Environmental Science and Technology, 35, p. 354-361.

ANEXO A – Bases de dados

A.1. Dados geográficos

A.2. Dados ambientais

A.3. Dados dos derrames

A.1. Dados Geográficos

A.1.1. ETOPO2

Descrição:

Esta é uma base de dados de topografia/batimetria global com uma resolução espacial de 2 minutos. Foi utilizada uma projecção cilíndrica equidistante, com 360° de longitude e 180° de latitude. As bases de dados são processadas através da ferramenta de processamento de dados geográficos.

Localização:

- Sistema de Informação/Bases de dados/Dados Geográficos/ETOPO2

Fontes:

<http://dss.ucar.edu/datasets/ds759.3/data/>

<http://www.ngdc.noaa.gov/mgg/image/2minrelief.html>

Tamanho aproximado: Cerca de 345MB não comprimidos

A.1.2. GSHHS

Descrição:

Esta é uma base de dados de alta resolução de linhas de costa, auto-consistente, constituída por polígonos fechados.

As bases de dados são processadas através da ferramenta de processamento de dados geográficos.

Localização:

Sistema de Informação/Bases de dados/Dados Geográficos/GSHHS

Fontes:

<Http://www.ngdc.noaa.gov/mgg/shorelines/gshhs.html>

Tamanho aproximado: de cerca de 416 KB (resolução mínima) a 246 MB (resolução máxima) em ficheiros não comprimidos.

A.2. Dados Ambientais

A.2.1. ARGO

Descrição:

Argo é um método de recolha de informação da camada superficial oceânica através de uma frota de robôs flutuantes. Registam dados de temperatura, salinidade e níveis de pressão. Os dados podem ser lidos com a ferramenta de leitura de ficheiros NetCDF.

Localização:

Sistema de informação/Bases de dados/Dados Ambientais/ARGO

Fontes:

<http://Argo.jcommops.org>

Tamanho aproximado: Variável consoante o número de ficheiros. Os ficheiros diários de perfis de temperatura e salinidade variam de cerca 500 KB a cerca de 2 MB. Os ficheiros de trajectórias de bóias podem ir em média até cerca de 500 KB.

A.2.2. World Ocean Atlas

Descrição

Um conjunto de cartografias digitais temáticas dos oceanos, contendo dados de temperatura, salinidade, oxigénio dissolvido, entre outras. No sistema encontram-se dados da Levitus 94 e do WOA01. Os dados Levitus94 podem ser lidos com a ferramenta de leitura de ficheiros NetCDF, os dados do WOA01 possuem uma ferramenta própria em código FORTRAN.

Localização:

Sistema de informação/Bases de dados/Dados Ambientais/WOA

Fontes:

<http://www.nodc.noaa.gov/OC5/indprod.html>

Tamanho aproximado: Variável consoante o número de ficheiros. Os ficheiros diários de dados do WOA01 têm cerca de 12.5 MB. Os ficheiros de médias mensais do Levitus94 são de cerca de 60 MB.

A.2.3. QuickScat

Descrição

É um conjunto de dados relativos a campos de velocidade do vento à superfície oceânica com uma resolução de 25 km. Os dados são apresentados sob a forma de dados diários e armazenados em formato HDF.

Localização:

Sistema de informação/Bases de dados/Dados Ambientais/QuickScat

Fontes:

[Http://podaac.jpl.nasa.gov](http://podaac.jpl.nasa.gov)

Tamanho aproximado: Variável consoante o número de ficheiros. Os ficheiros diários de dados têm cerca de 32.5 MB

A.2.4. SR95

Descrição:

O SR95 é um modelo de previsão de marés que utiliza uma série de funções periódicas para o cálculo da altura da superfície oceânica em determinado tempo e local. Este modelo utiliza uma série de componentes harmónicas capazes de descrever com alguma precisão os fenómenos responsáveis pela variação da maré.

Os dados relativos às componentes harmónicas encontram-se em formato binário, e são processados pelo modelo SR95 que está implementado na ferramenta de processamento de dados desenvolvida

Localização:

Sistema de informação/Bases de dados/Dados Ambientais/SR95

Fontes:

[Http://www.jpl.nasa.gov](http://www.jpl.nasa.gov)

Tamanho aproximado: Cerca de 20 MB não comprimidos.

A.2.5. TOPEX/Poseidon e Jason-1

Descrição:

Os dados destes satélites são relativos a descrição da topografia oceânica. Possuem dados de elevação marítima com o objectivo de quantificar a altura significativa de onda e consequente agitação marítima. Os dados estão disponíveis em formato ASCII, e podem ser processados por um programa específico para tal. Juntamente com os dados é fornecido o código do programa em linguagem C para processamento da informação

Localização:

Sistema de informação/Bases de dados/Dados Ambientais/
TOPEX/Poseidon_Jason-1

Fontes:

[Http://topex.jpl.nasa.gov/missions/](http://topex.jpl.nasa.gov/missions/)

Tamanho aproximado: Variável consoante o número de ficheiros. Os ficheiros diários de dados variam mas sem ultrapassar os 100 KB

A.3. Dados dos derrames

A.3.1. Informações dos acidentes

Descrição:

Aqui encontram-se dados de várias fontes relativas a dados históricos dos acidentes que interessam ao sistema. Estas informações podem ser fornecidas muitas vezes pelas autoridades e organismos competentes no assunto. Estes dados são por vezes fornecidos on-line, ou podem ser obtido através de contacto directo com estes organismos.

Localização:

Sistema de informação/Bases de dados/Dados dos Derrames/Informação dos Acidentes

Fontes:

[Http://spills.incidentnews.gov /](http://spills.incidentnews.gov/)

Tamanho aproximado: Variável consoante o tipo de informação. Determinado caso a caso.

A.3.2. Dados dos produtos derramados

Descrição:

Aqui encontram-se dados de várias fontes relativas a dados históricos dos acidentes que interessam ao sistema. Estas informações podem ser fornecidas muitas vezes pelas autoridades e organismos competentes no assunto. Estes dados são por vezes fornecidos on-line, ou podem ser obtido através de contacto directo com estes organismos.

Localização:

Sistema de informação/Bases de dados/Dados dos Derrames/Dados dos produtos derramados

Fontes:

[Http://www.mms.gov/tarprojects/120.html](http://www.mms.gov/tarprojects/120.html)

[Http://www.epa.gov](http://www.epa.gov)

Tamanho aproximado: Variável consoante o tipo de informação. Determinado caso a caso.

**ANEXO B - Características físico-químicas
do fuel oil derramado pelo N/T Prestige**

Os dados aqui apresentados são resultantes de um conjunto de análises efectuadas pelo *Istitut Français du Petrole* (IFP, 2003).

Quadro B.1 – Principais características do Fuel oil n.º6

| Parâmetro | Especificações | Prestige |
|--------------------|--|---------------------------|
| Viscosidade a: | | |
| 50°C | superior a 110 mm ² /s | 615 mm ² /s |
| 100°C | inferior a 40 mm ² /s | Não determinado neste dia |
| Teor em enxofre | TBTS inferior ou igual a 1 % (m/m) BTS inferior ou igual a 2 % (m/m) HTS inferior ou igual a 4 % (m/m) | 2.6 % m/m |
| Destilação | menos de 65 % a 250°C menos de 85 % a 350°C | 3.8 % m/m 13.9 % m/m |
| Ponto de ignição | igual ou superior a 70°C | Não determinado |
| Teor em insolúveis | inferior ou igual a 0,25 % (m/m) | 0.2 % m/m |

Quadro B.2 – Repartição das grandes classes de produtos por espectroscopia de massa de alta resolução

| | Combustível de origem "Prestige" %m/m | Remanescente no mar "Prestige" %m/m |
|----------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|
| Saturados | 29.7 | 28.2 |
| Aromáticos não sulfurosos | 31.5 | 31.0 |
| Monoaromaticos | 9.0 | 8.6 |
| Diaromaticos | 9.0 | 8.7 |
| Triaromaticos | 5.0 | 5.5 |
| Tétraromaticos | 6.0 | 5.9 |
| Pentaromaticos | 2.5 | 2.3 |
| Hexaromaticos | 0.0 | 0.0 |
| Aromáticos sulfurosos | 15.8 | 15.8 |
| Benzothiofenos | 5.2 | 5.6 |
| Dibenzothiofenos | 4.1 | 3.8 |
| Naphtaleno-thiofenos | 4.5 | 4.4 |
| Disulfurosos | 2.0 | 2.0 |
| Total | 77.0 | 75.0 |

Quadro B.3 – Repartição por famílias químicas por espectrometria de massa de alta resolução das fracções saturadas+aromáticas

| Tipos | Combustível de origem Prestige | | Prestige Remanescente no mar desidratado | |
|--|--------------------------------|-------------|--|-------------|
| | S+A | Total * | S+A | Total** |
| Total Saturados | 38,6 | 29,7 | 37,7 | 28,2 |
| CnH2n+2 | 12,2 | 9,4 | 11,7 | 8,8 |
| CnH2n | 11,9 | 9,2 | 11,9 | 8,9 |
| CnH2n(-2,-4,-6) | 14,5 | 11,2 | 14,1 | 10,5 |
| Total Aromáticos não sulfurosos | 40,9 | 31,5 | 41,3 | 31,0 |
| Total Monoaromaticos | 11,7 | 9,0 | 11,4 | 8,6 |
| CnH2n-6 | 4,6 | 3,5 | 4,3 | 3,2 |
| CnH2n-8 | 4,0 | 3,1 | 3,9 | 2,9 |
| CnH2n-10 | 3,1 | 2,4 | 3,2 | 2,4 |
| Total Diaromaticos | 11,7 | 9,0 | 11,6 | 8,7 |
| CnH2n-12 | 4,1 | 3,2 | 4,1 | 3,1 |
| CnH2n-14 | 4,2 | 3,2 | 4,2 | 3,2 |
| CnH2n-16 | 3,4 | 2,6 | 3,3 | 2,5 |
| Total Triaromaticos | 6,5 | 5,0 | 7,3 | 5,5 |
| CnH2n-18 | 5,0 | 3,9 | 5,6 | 4,2 |
| CnH2n-20 | 1,5 | 1,2 | 1,7 | 1,3 |
| Total Tétraaromaticos | 7,8 | 6,0 | 7,9 | 5,9 |
| CnH2n-22 | 5,1 | 3,9 | 5,1 | 3,8 |
| CnH2n-24 | 1,4 | 1,1 | 1,5 | 1,1 |
| CnH2n-26 | 1,3 | 1,0 | 1,3 | 1,0 |
| Total Pentaaromaticos | 3,2 | 2,5 | 3,1 | 2,3 |
| CnH2n-28 | 2,1 | 1,6 | 1,9 | 1,4 |
| CnH2n-30 | 1,1 | 0,8 | 1,2 | 0,9 |
| Total Hexaaromaticos | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 |
| Total Aromáticos sulfurosos | 20,5 | 15,8 | 21,0 | 15,8 |
| Benzothiofenos | 6,7 | 5,2 | 7,5 | 5,6 |
| CnH2n-(10,12,14S) | 6,7 | 5,2 | 7,5 | 5,6 |
| Dibenzothiofenos | 5,3 | 4,1 | 5,0 | 3,8 |
| CnH2n-16S | 3,5 | 2,7 | 3,2 | 2,4 |
| CnH2n-18S | 0,7 | 0,5 | 0,8 | 0,6 |
| CnH2n-20S | 1,1 | 0,8 | 1,0 | 0,8 |
| Naphtalenothiofenos | 5,9 | 4,5 | 5,9 | 4,4 |
| CnH2n-22S | 2,1 | 1,6 | 2,1 | 1,6 |
| CnH2n-24S | 1,4 | 1,1 | 1,9 | 1,4 |
| CnH2n-26S | 1,5 | 1,2 | 1,1 | 0,8 |
| CnH2n-28S | 0,9 | 0,7 | 0,8 | 0,6 |
| Disulfurosos | 2,6 | 2,0 | 2,6 | 2,0 |
| CnH2n-20S2 | 0,9 | 0,7 | 0,7 | 0,5 |
| CnH2n-22S2 | 0,3 | 0,2 | 0,5 | 0,4 |
| CnH2n-24S2 | 0,4 | 0,3 | 0,4 | 0,3 |
| CnH2n-26S2 | 0,3 | 0,2 | 0,3 | 0,2 |
| CnH2n-28S2 | 0,2 | 0,2 | 0,2 | 0,2 |
| CnH2n-30S2 | 0,1 | 0,1 | 0,2 | 0,2 |
| CnH2n-32S2 | 0,4 | 0,3 | 0,3 | 0,2 |

* (s+a)*0.77

** (s+a)*0.75

*** (s+a)*0.8

Quadro B.4 – Determinação dos BTEX (Hidrocarbonetos Aromáticos) e dos derivados do naftaleno contidos no fuel oil do Prestige

| Hidrocarbonetos | Teor presente no fuel oil do "Prestige" (ppm) |
|-------------------|---|
| Benzeno* | ≤ 12 |
| Tolueno | 41 |
| Etil-Benzeno | 38 |
| Métil/para-Xileno | 129 |
| OrtoXileno | 79 |
| Total BTEX | 298 |
| Naftaleno | 350 |
| 1 metil Naftaleno | 1373 |
| 2 metil Naftaleno | 715 |

*: *co-elução parcial com o metil-1 ciclopenteno*

Quadro B.5 - Concentração em hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (HAP) presentes na água do mar após um contacto de 5 dias com o fuel de referência do Prestige e do produto emulsionado

| Composto | Concentração em HAP [µg/L] | |
|------------------------------------|----------------------------|---------|
| | Original | Emulsão |
| Napftaleno | 78 | 73 |
| Acenaftileno | 1,4 | 1,5 |
| Acenafteno | 48 | 54 |
| Fluoreno | 1,8 | 1,8 |
| Fenantreno | 2,6 | 2,7 |
| Antraceno | 0,2 | 0,1 |
| Fluoranteno | 0,7 | 0,3 |
| Pireno | <0.2 | <0.2 |
| Benz(a)antraceno | <0.02 | <0.02 |
| Chriseno | <0.03 | <0.03 |
| Benzo(b)fluoranteno | <0.01 | <0.01 |
| Benzo(k)fluoranteno | <0.23 | <0.23 |
| Benzo(a)pireno | <0.14 | <0.14 |
| Dibenz(a,h)antraceno | <0.02 | <0.02 |
| Benzo(g,h,i)perileno | <0.01 | <0.01 |
| Indeno(c,d)pireno | <0.01 | <0.01 |
| Soma dos 16 HAP (Lista EPA) | 132 | 133 |
| Soma dos HAP – Naftaleno deduzidos | 54 | 60 |

Quadro B.6 – Concentração em hidrocarbonetos voláteis presentes na água do mar após um contacto de 5 dias com o fuel de referência do Prestige e do produto emulsionado

| Constituinte | Concentração ⁽¹⁾ [µg/L] | |
|------------------------------|------------------------------------|---------|
| | Original | Emulsão |
| BENZENE | 38 | 9 |
| TOLUENE | 62 | 17 |
| ETHYLBENZENE | 15,3 | 5,7 |
| META-XYLENE | 28 | 11 |
| PARA-XYLENE | 11,3 | 4,4 |
| ORTHO-XYLENE | 30 | 12 |
| ISOPROPYLBENZENE | 0,18 | 0,11 |
| N-PROPYLBENZENE | 3,5 | 1,63 |
| 1-METHYL-3-ETHYLBENZENE | 9,0 | 4,4 |
| 1-METHYL-4-ETHYLBENZENE | 4,0 | 1,92 |
| 1,3,5-TRIMETHYLBENZENE | 4,5 | 2,4 |
| 1-METHYL-2-ETHYLBENZENE | 7,4 | 3,6 |
| 1,2,4-TRIMETHYLBENZENE | 22 | 12 |
| 1,2,3-TRIMETHYLBENZENE | 11,3 | 6,7 |
| 1-METHYL-4-ISOPROPYLBENZENE | 0,88 | 0,45 |
| 1-METHYL-3-ISOPROPYLBENZENE | 0,82 | 0,44 |
| INDANE | 6,4 | 3,9 |
| 1-METHYL-2-ISOPROPYLBENZENE | 0,21 | 0,10 |
| 1,3-DIETHYLBENZENE | Nd | Nd |
| 1-METHYL-3-N-PROPYLBENZENE | 1,85 | 1,05 |
| 1-METHYL-4-N-PROPYLBENZENE | 1,28 | 0,76 |
| 1,3-DIMETHYL-5-ETHYLBENZENE | 2,8 | 1,70 |
| 1,4-DIETHYLBENZENE | 0,85 | 0,45 |
| 1-METHYL-2-N-PROPYLBENZENE | 1,59 | 0,86 |
| 1,4-DIMETHYL-2-ETHYLBENZENE | 3,1 | 1,92 |
| 1,2-DIMETHYL-3-ETHYLBENZENE | 2,4 | 1,54 |
| 1-METHYLINDANE | 0,072 | 0,049 |
| 1,2-DIMETHYL-4-ETHYLBENZENE | 4,9 | 3,0 |
| 1,3-DIMETHYL-2-ETHYLBENZENE | Nd | Nd |
| 1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE | 2,5 | 1,8 |
| 1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE | 5,0 | 3,5 |
| 5-METHYLINDANE | 2,9 | 2,1 |
| 4-METHYLINDANE | 5,1 | 3,9 |
| 1,2,3,4-TETRAMETHYLBENZENE | 7,5 | 5,3 |
| TETRALINE | 0,88 | 0,70 |
| NAPHTALENE | 67 | 56 |
| 2-METHYLNAPHTALENE | 0,77 | 0,75 |
| 1-METHYLNAPHTALENE | 14,3 | 12,7 |
| HIDROCARBONETOS TOTAIS | 573 | 325 |
| HIDROCARBONETOS MAIORITARIOS | 380 | 195 |
| BTEX | 185 | 59 |

(1): análise por GC-FID - cromatografia em fase gasosa com detecção por ionização de chama. Identificação e quantificação por Hydrostar.

Nd: não detectado (concentrações inferiores a 0,02 µg/L)