# MODELO DE TRANSPORTE DE ÓLEO BASEADO NO ESQUEMA NUMÉRICO ADI

Tatiana Silva Sciammarella Vicente

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

Aprovada por:

Prof. Luiz Landau, D.Sc.

Prof. Audálio Rebelo Torres Junior, D.Sc.

Prof. Elson Magalhães Toledo, D.Sc.

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

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL ABRIL DE 2008

# Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

# VICENTE, TATIANA SILVA

# SCIAMMARELLA

Modelo de Transporte de Óleo baseado no Esquema Numérico ADI [Rio de Janeiro] 2008 IX, 80 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia Civil, 2008) Dissertação - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Transporte de óleo

2. Modelagem numérica

3. Método numérico

I. COPPE/UFRJ II. Título ( série )

'A vida não é feita de momentos em que respiramos, mas sim de momentos em que perdemos o fôlego.'

Um Estranho no Bar

# AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus amigos que nunca me faltaram com apoio,

a minha mãe e ao meu pai que sempre estiveram do meu lado,

a todos os meus professores que me ensinaram o que eu sei hoje,

ao meu orientador Audálio, por todas as idéias mirabolantes que acreditava que eu seria capaz de concretizar,

ao Ricardo Marcelo meu mentor que me ensinou a gostar de modelagem e a vida.

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

# MODELO DE TRANSPORTE DE ÓLEO BASEADO NO ESQUEMA NUMÉRICO ADI

Tatiana Silva Sciammarella Vicente

Abril/2008

Orientador: Luiz Landau

Programa: Engenharia Civil

Neste trabalho é apresentado um modelo computacional de transporte, denominado ADOIL, desenvolvido para estudar a advecção e difusão de uma mancha de óleo derramada em um corpo de água assim como os efeitos que esta sofre devido aos processos espalhamento e evaporação. Com este objetivo o modelo desenvolvido foi baseado na equação bidimensional de advecção-difusão, sendo discretizada em sua forma semi-implícita pelo método numérico *Alternating-Direction Implicit* (ADI). Quatro versões do esquema ADI foram implementadas no modelo ADOIL e a clássica de Peaceman-Rachford foi escolhida por apresentar os melhores resultados. Para analisar a eficiência do algoritmo do modelo na resolução do transporte de uma mancha de óleo, foram realizados experimentos em casos testes de controle, onde o modelo apresentou resultados satisfatórios em relação aos processos de advecção, difusão, espalhamento e evaporação, mantendo a conservação de massa com valores acima de 98 %, em todos os experimentos.

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

### OIL TRANSPORT MODEL BASED ON ADI NUMERICAL SCHEME

Tatiana Silva Sciammarella Vicente

# Abril/2008

Advisor: Luiz Landau

Department: Civil Engineering

In this work is presented a computational oil transport model developed to study the advection and diffusion of oil drift on a body of water as well as the effects that it suffers due to spreading and evaporation processes. With this purpose the model was developed based on the advection-diffusion equation, and the equation was solved applying the ADI scheme. Four versions of ADI scheme were implemented in the model ADOIL and Peaceman-Rachford is scheme achieved the best performance. The model efficiency to solve the oil slick transport, was studied by, some experiments involving advection, diffusion, spreading and evaporation process, keeping mass conservation greater than 98% in all of experiments.

# ÍNDICE DO TEXTO

1.0 Introdução	1
2.0 Objetivos	3
3.0 Revisão bibliográfica de modelos de transporte de óleo	4
4.0 Transporte de massa	7
4.1 Transporte advectivo-difusivo	7
4.2 Abordagem Euleriana	10
4.3 Abordagem Lagrangeana	11
5.0 Processos Físico-químicos que ocorrem ao petróleo	12
5.1 Espalhamento	14
5.2 Evaporação	16
5.3 Dissolução	20
5.4 Emulsificação	21
5.5 Dispersão	22
5.6 Biodegradação	23
5.7 Foto-oxidação	23
5.8 Sedimentação	24
6.0 Metodologia	25
6.1 Descrição do modelo ADOIL	25
6.2 O método numérico Alternating-direction Implicit – ADI	26
6.3 Discretização da equação de advecção-difusão	27
6.3.1 Discretização do primeiro semi-intervalo de tempo	
6.3.2 Resolução das equações do primeiro semi-intervalo de tempo	29
6.3.3 Discretização do segundo semi-intervalo de tempo	
6.3.4 Resolução das equações do segundo semi-intervalo de tempo	32
7.0 Experimentos e Resultados	35

7.1 Condição Inicial e de Contorno	5
7.1.1 Condição Inicial	5
7.1.2 Condição de Contorno	6
7.2 Cenários utilizados nos experimentos	7
7.2.1 Cenário 1: Canal Simples3	7
7.2.2 Cenário 2: Canal Cíclico	8
7.2.3 Cenário 3: Teste de Molenkamp	9
7.3 Experimento realizado para escolher o método numérico mais adequado4	0
7.4 Experimento realizado para definir o número de pontos necessários par uma mancha de óleo com eficiência	a
7.5 Experimento realizado para analisar a estabilidade numérica do modelo ADOIL	a
parir do número de CFL4	9
7.6 Experimento realizado para verificar a eficiência do modelo ADOIL na resoluçã	0
de um problema de advecção pura5	1
7.6.1 Utilizando o Cenário 2 (Canal Cíclico)5	1
7.6.2 Utilizando o Cenário 3 (Molenkamp)5	3
7.7 Experimento realizado para analisar a eficiência do modelo ADOIL no processo	
de difusão pura5	5
7.8 Experimento realizado para avaliar a resolução do modelo ADOIL no processo d	e
advecção-difusão de uma mancha de óleo5	7
7.9 Experimento realizado para avaliar ao processo de espalhamento de uma manch	a
de óleo no modelo ADOIL5	9
7.10 Experimento realizado para avaliar ao processo de evaporação de uma manch	a
de óleo no modelo ADOIL6	3
7.11Experimento realizado para avaliar a interação entre os processos de espalhament	0
e evaporação no modelo ADOIL	6
7.12 Experimento realizado para avaliar a eficiência do modelo ADOIL no transport	e
de uma mancha de óleo submetida à advecção-difusão e aos processos de evaporaçã	0
e espalhamento6	8
8.0 Discussão e Conclusão7	1
9.0 Referências Bibliográficas	3

77
/

#### 1.0 Introdução

Nos últimos anos o aumento da contaminação dos oceanos e zonas costeiras por derrames de petróleo tem despertado a preocupação crescente de uma sociedade que ainda baseia seu desenvolvimento na indústria do petróleo, apesar dos grandes investimentos feitos em pesquisa de fontes alternativas de energia.

O trajeto do petróleo desde a fonte até o consumidor final envolve diversos processos, como a exploração e produção, transporte por dutos e navios tanque e armazenagem, podendo ocorrer acidentes que ocasionam vazamentos em qualquer uma destas operações.

De acordo com o *The International Owners Pollution Federation Limited* – *ITOPF* (2002), apesar da maioria dos acidentes apresentarem vazamentos inferiores a 7 toneladas de petróleo, grande parte do petróleo derramado é conseqüência de um pequeno numero de acidentes de grande porte (acima de 700 toneladas). Por exemplo, no período de dez anos 1990-1999, houve 358 derrames de mais de 7 toneladas, num total de 1138 mil toneladas, porém 830 mil toneladas (73%) foram derramadas em apenas 10 incidentes (pouco menos de 3%).

Um derrame de petróleo e de seus derivados, por menor que seja, tem sempre conseqüências indesejáveis. Estes eventos são prejudiciais, principalmente, a nível ambiental e econômico. A extensão dos efeitos de um acidente deste tipo depende de um conjunto de fatores agravantes, como por exemplo, o volume e propriedades do contaminante derramado, condições meteorológicas durante o derrame (vento, agitação do mar, etc.), sensibilidade do local, medidas de combate implementadas, etc.

Portanto, as conseqüências adversas que surgem com os vazamentos, motivam desde já uma preocupação no que diz respeito não só à monitoração e acompanhamento da mancha de contaminante, mas também na capacidade de diagnosticar e prognosticar eficazmente o comportamento e a trajetória do óleo derramado nas horas seguintes.

É neste contexto que se torna relevante o desenvolvimento de modelos de simulação de derrames de óleo, fundamentais para a gerência de análise de riscos, tomada de decisões de contenção em caso de acidentes, planejamento de barreiras flutuantes, determinação das áreas que serão atingidas e afetadas pelo vazamento de óleo.

Ao longo das ultimas décadas, a modelagem numérica vem se desenvolvendo e atualmente existe um grande número de modelos de transporte de óleo em uso. Estes

variam entre os modelos de simples trajetória, ou de partícula, até modelos de trajetória tri-dimensional que incluem os

# 2.0 Objetivos

O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo euleriano de transporte de óleo, para estimar a trajetória de uma mancha e os processos de espalhamento e evaporação que esta sofre ao ser derramada em um corpo de água.

Neste modelo também será analisada a aplicação do método numérico *Alternating-Direction Implicit* – ADI na discretização da equação de transporte de advecção-difusão, discutindo-se suas vantagens e desvantagens.

Como objetivo final, pretendeu-se desenvolver e implementar um modelo de transporte de óleo com um código fonte simples e de fácil compreensão, para que possa ser divulgado e aprimorado em futuros estudos de modelagem numérica.

# 3.0 Revisão bibliográfica de modelos de transporte de óleo

A seguir será feita uma descrição sucinta dos principais modelos de óleo já desenvolvidos.

Fay (1969), foi um dos precursores no estudo de modelagem de derrames de petróleo, caracterizando o comportamento de uma mancha de petróleo a partir das forças que atuam no espalhamento da mesma dividindo o fenômeno em três fases, gravitacional–inercial, gravitacional–viscoso e viscosa–tensão superficial. Em seus estudos o espalhamento é considerado em águas calmas, onde a mancha inicialmente circular permanece circular, conforme se aumenta seu diâmetro.

Fannelop e Waldman (1971) realizaram um estudo teórico sobre o espalhamento, integrando as equações da conservação da massa e quantidade de movimento na espessura da mancha. O regime de espalhamento em tensão superficial é equacionado aproximadamente, fazendo-se um equilíbrio de forças na borda da mancha e utilizando a mesma correlação para a tensão cisalhante na interface.

Hoult (1972) propôs que o espalhamento do óleo, levando em conta as correntes advectivas, seria dividido em duas partes: a advecção devida às correntes e aos ventos e a tendência natural do óleo a se espalhar em águas calmas.

DiPietro *et al.* (1978) apresentaram um modelo teórico que acopla as equações da camada limite às equações do movimento da mancha de óleo, através de um método de perturbação e solução por similaridade, utilizando como parâmetro de perturbação a relação entre a espessura da mancha e sua largura. Este modelo traz a hipótese que os vetores normais às superfícies da mancha são verticais devido ao fato de considerar este parâmetro de perturbação pequeno.

Hess e Kerr (1979) apresentaram um modelo onde o transporte da mancha de óleo tem como forçante as correntes e ventos. Este modelo aborda as equações de conservação da massa e quantidade de movimento aplicadas à mancha de óleo integradas na direção vertical. Para o espalhamento o modelo considera as três fases descritas por Fay (1969), levando em conta todas as forças atuantes sobre a mancha, gravidade, tensão superficial, inércia e viscosidade.

Benqué *et al.* (1982) apresentam um modelo bi-dimensional para regime gravitacional-viscoso. Neste modelo os termos convectivos não são considerados, em virtude disso o modelo se torna um simples balanço entre as tensões devidas às correntes, os ventos e as forças gravitacionais, tendo a espessura da mancha calculada

em uma única equação.

Shen e Yapa (1988) utilizaram um algoritmo de Parcelas Discretas Lagrangeanas (Lagrangian Discrete Parcel Algorithm) para avaliar a advecção e o espalhamento. Este modelo também considera derrames contínuos ou instantâneos, levando em conta a evaporação, diluição, difusão turbulenta horizontal e deposição na costa.

Reed & Knauss (1988) desenvolveram o modelo lagrangeano COZOIL (*Coastal Zone Oil Spill Model*). Este descreve o comportamento da mancha de óleo antes e depois de atingir a linha de costa, considerando que a mancha apresenta inicialmente um formato circular e ao se aproximar da linha de costa esta se torna elíptica. O autor considera como forças atuantes do transporte: as correntes, o vento e as ondas próximos a costa. Neste modelo são considerados os processos físico-químicos de espalhamento, evaporação, entranhamento, dissolução e emulsificação.

Cuesta *et al.* (1990), desenvolveram um modelo semelhante ao de Benqué *et al.* (1982) tendo como diferencial os efeitos da linha de costa, como a dispersão e o acumulo de óleo, tratados em sua condição de contorno. Neste modelo são consideradas como forças atuantes no transporte as correntes de maré, correntes residuais e os ventos. Este modelo foi testado e comparado com valores observados do derrame do petroleiro Amoco Cadiz, mostrando bons resultados.

Borthwick e Joynes (1992) apresentaram um modelo advectivo-difusivo aplicável em pequena escala para derrames em regiões costeiras. Este modelo considera que a força atuante no espalhamento é a força turbulenta induzida pelas ondas na zona de arrebentação.

A National Oceanic and Atmospheric and Administration Hazardous Materials Response Division (NOAA/HAZMAT) em 1994 desenvolveu a primeira versão do modelo Automated Data Inquiry for Oil Spills - ADIOS, com a finalidade de auxiliar na contenção de derrames de óleo. Este modelo não apresenta uma discretização do transporte de óleo, seu foco é direcionado a resolução dos principais processos físicoquímicos do petróleo como o espalhamento, evaporação, dispersão, sedimentação e emulsificação. Neste modelo encontramos uma grande base de dados que apresenta as principais características físicas e químicas de cerca de mil tipos de óleo diferentes (LEHR et al., 2001).

A Hazardous Materials Response Division (HAZMAT) do National Oceanic and Atmospheric Administration Office of Response and Restoration (NOAA OR&R) desenvolveu em 1999 um modelo de transporte de óleo lagrangeano denominado de "*General NOAA Oil Modeling Environment*" (GNOME). Este modelo foi desenvolvido para simular a trajetória do óleo derramado a partir de forçantes físicas como o vento, correntes e marés. O modelo considera ainda, o efeito de espalhamento e a possibilidade de incluir a incerteza associada a cada uma das forçante consideradas na trajetória do óleo (Beegle-Krause, 1990).

Tkalich *et al.* (2003), desenvolveu um modelo euleriano de transporte de óleo denominado *Multiphase Oil Spill Model - MOSM*. Este é um modelo multi-fásico que resolve suas seis variáveis simultaneamente: concentração de óleo na coluna de água nas fases dissolvida, emulsificada e particulada, espessura da mancha de óleo na superfície da água, e concentração de óleo nos sedimentos de fundo nas fases dissolvida e particulada.

O Laboratório de Modelagem de Processos Marinhos e Atmosféricos (LAMMA) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), desenvolveu o modelo de transporte NICOIL para simular o comportamento e a trajetória do óleo no ambiente marinho (LIMA *et al.*, 2001). Este é um modelo bidimensional baseado na abordagem euleriana que simula a dispersão do óleo em termos da variação da espessura da camada flutuante.

#### 4.0 Transporte de massa

A descrição sobre o transporte de massa a seguir foi baseada no trabalho realizado por Rosman (1997).

Em modelagem de transporte de massa é importante que se defina a escala de interesse do estudo. A menor escala que pode ser aplicável é aquela na qual a substância a ser estudada é considerada sempre contínua, assim uma "partícula" é a menor parcela da substância que podemos referenciar e qualquer propriedade (massa, velocidade, temperatura, salinidade e etc.) ou princípio de conservação se aplica no mínimo a uma partícula. O que ocorre na realidade é que a escala de interesse é bem maior que esta escala mínima, uma vez que, dentro da modelagem de transporte de constituintes o grande interesse é voltado para o movimento do conjunto de partículas em escoamento, e o transporte realizado por tal escoamento, que leva as diversas substâncias e propriedades das partículas para diferentes lugares num corpo de água.

#### 4.1 Transporte advectivo-difusivo

No momento em que se define a escala de interesse do fenômeno a ser estudado, este pode apresentar dois tipos de movimento, o resolvível, que pode ser observado e medido na escala de interesse, e o não resolvível, que tem que ser modelado através de variáveis nas escalas resolvíveis. Todo o movimento resolvível é denominado advectivo, e todo o movimento não resolvível é denominado difusivo.

O movimento de transporte não resolvível é modelado em termos de grandezas resolvíveis, através de parametrizações, ou quando se está na escala instantânea pontual das partículas, utiliza-se aplicações de leis físicas, como na difusão molecular de massa que é explicada pela Lei de Fick.

Para a determinação do transporte de constituintes presentes na massa de uma partícula de água de qualquer corpo de água, aplica-se o princípio da conservação da massa do constituinte.

O modelo conceitual deste princípio pode ser escrito como: "a variação por unidade de tempo da massa de contaminante dentro de um volume de controle, é igual ao fluxo de entrada menos o fluxo de saída, mais a massa resultante das reações de produção ou consumo no interior do volume por unidade de tempo". Baseado neste princípio, foi esquematizado como volume de controle, um cubo de dimensões  $\Delta_{x_{x}} \Delta_{y_{y}} \Delta_{z_{y}}$  onde a massa de constituinte no interior deste cubo em dado instante será o produto da concentração de constituinte *C* pelo volume de controle  $\Delta_{x}\Delta_{y}\Delta_{z}$ . O esquema do balanço da massa de constituinte, numa dada direção *x*, está representado na Figura 1.



Figura 1: Esquema do balanço de massa de constituinte na direção x. Adaptado de Rosman, 1997.

Na figura anterior,  $u_c$  corresponde à componente de velocidade do constituinte na direção x. O fluxo de saída é obtido a partir do fluxo de entrada através da expansão da série de Taylor ao longo de  $\Delta_{x}$ .

Para as direções  $y \in z$ , o esquema é análogo, considerando respectivamente os fluxos  $v_c C \Delta_x \Delta_z e w_c C \Delta_x \Delta_y$  e expansões em série de Taylor ao longo de  $\Delta_y e \Delta_z$ , onde  $v_c$  $e w_c$  correspondem respectivamente às componentes de velocidades de transporte de constituinte nas direções y e z.

Considerando todas as direções, a variação local resultante da concentração do constituinte no tempo é representada pela equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{\partial u_c C}{\partial_x} + \frac{\partial v_c C}{\partial_y} + \frac{\partial w_c C}{\partial_z}\right) + \sum R_c$$
(1.0)

onde  $\frac{\partial u_c C}{\partial_x}$ ,  $\frac{\partial v_c C}{\partial_y} e \frac{\partial w_c C}{\partial_z}$  correspondem a variação local da concentração C de constituinte, em decorrência de um fluxo resultante nas direções x, y e z,

respectivamente e  $\sum R_c$  corresponde ao somatório das reações de produção e consumo do constituinte.

As velocidades de transporte do constituinte  $u_c$ ,  $v_c e w_c$  não são resolvíveis, visto que não se consegue medir a exata velocidade com que um constituinte é transportado num meio fluido. O que é resolvível, e mensurável, é a velocidade do escoamento com componentes u, v e w. Com isso, um artifício matemático é utilizado para separar o fluxo de constituinte em uma parte resolvível e outra não resolvível:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z}\right) - \left[\frac{\partial}{\partial x}(u_c - u)C + \frac{\partial}{\partial y}(v_c - v)C + \frac{\partial}{\partial z}(w_c - w)C\right] + \sum R_c$$
(1.1)  
Taxa de variação especial do fluxo. Taxa de variação especial do fluxo pão

Taxa de variação espacial do fluxoTaxa de variação espacial do fluxo nãoresolvível em x, y e z.resolvível em x, y e z.

O fluxo não resolvível, que é considerado como fluxo difusivo turbulento, pode ser parametrizado aplicando-se uma lei semelhante à Lei de Fick  $\left(F = -K\left[\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z}\right]\right)$ , assim temos:

$$[(u_c - u) + (v_c - v) + (w_c - w)]C = -K\left[\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z}\right]$$
(1.2)

onde *K* corresponde ao coeficiente de difusão turbulenta e  $\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z}$  corresponde ao gradiente de concentração, cujo sinal negativo indica que a orientação do fluxo parte das regiões de alta concentração do constituinte em direção às regiões de baixa concentração.

Com tudo isso, ao substituirmos a equação (1.2) em (1.1), o princípio de conservação de massa por unidade de volume passa a ser escrito como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z}\right) + K\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) + \sum Rc$$
(1.3)

Finalmente, expandindo-se o termo advectivo e usando a condição de

escoamento incompressível,  $\frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = 0$ , obtém-se a equação de transporte advectivo-difusivo de constituintes :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\underbrace{u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} + w\frac{\partial C}{\partial z}}_{b}\right) + \underbrace{K\left(\frac{\partial^{2}C}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}C}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2}C}{\partial z^{2}}\right)}_{c} + \underbrace{\sum_{d} Rc}_{d}$$
(1.4)

onde (a) corresponde à variação local da concentração do constituinte no tempo; (b) ao balanço do fluxo advectivo; (c) ao balanço do fluxo difusivo e (d) ao somatório das reações de produção e consumo.

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

A equação de transporte advectivo-difusivo, utilizada para descrever a dispersão de constituintes em corpos de água, pode ser resolvida aplicando métodos discretos tanto na formulação Euleriana quanto na Lagrangeana.

#### 4.2 Abordagem Euleriana

Dá-se o nome de descrição Euleriana àquela em que se observa o movimento através do escoamento das partículas que passam pelo ponto de observação. Nos modelos que utilizam a equação de transporte advectivo-difusivo, baseados na abordagem Euleriana, qualquer variável depende do tempo e da posição, a qual varia no tempo. Na região de medição das velocidades, a cada instante estamos medindo a velocidade de diferentes partículas, podendo haver variações na velocidade do escoamento.

Em termos matemáticos uma variável qualquer C é escrita numa descrição Euleriana da seguinte forma:

$$C = C(t, x(t), y(t), z(t))$$
(1.5)

onde o valor da variável C é função do tempo t e da posição x(t), y(t), z(t) que varia no tempo.

### 4.3 Abordagem Lagrangeana:

A seguir será feita uma descrição sucinta da abordagem lagrageana, pelo fato desta não ser utilizada no modelo ADOIL.

Na abordagem Lagrangeana, o movimento é descrito observando e acompanhando a partícula que se move, sendo que o movimento é independente da posição do observador. Neste tipo de descrição, a incógnita básica não é a concentração, mas a posição das partículas, e as velocidades são interpoladas a partir de pontos onde seus valores são previamente conhecidos.

Cada partícula representa o centro de massa de uma pequena mancha de constituinte com certa distribuição de concentração. A distribuição da concentração no meio escalar, C(x, y, z, t), é dada de modo indireto, pela soma de todas as manchas.

Na abordagem Lagrangeana, a acurácia da previsão das concentrações está diretamente relacionada ao número de partículas utilizado, o que pode resultar num custo computacional elevado em alguns casos (Mehdi, 2005).

# 5.0 Processos físico-químicos que ocorrem ao petróleo

Uma mancha de óleo ao ser derramada em um corpo de água, sofre complexas reações físico-químicos que modificam as propriedades do óleo e influenciam o balanço de massa global do sistema. Além disto, tais processos sofrem influência das condições ambientais externas a ela como temperatura do ar e da água, ventos, ondas, agitação do mar etc.

Cada produto do petróleo é composto por diversos componentes com propriedades distintas, como pontos de ebulição, solubilidade, viscosidade, densidade etc. Atualmente existem milhares de óleos com composição diferente, que apresentam comportamento distinto ao serem derramados em um corpo de água, o que dificulta a compreensão e a modelagem destes compostos.

Os principais processos físico-químicos e biológicos são: espalhamento; evaporação (volatilização); dissolução; emulsificação; dispersão; biodegradação; foto-oxidação; e sedimentação. Estes processos podem ser observados na figura a seguir:



Figura 2: Principais processos físico-químicos e biológicos que ocorrem a uma mancha de óleo no mar. Adaptado de ITOPF (2002).

Cada um desses processos é responsável pela retirada de uma parte da massa de óleo do corpo de água, diminuindo assim o volume inicial derramado. A atuação de cada processo ocorre de uma forma diferenciada, sendo que as proporções de cada um deles podem variar em função do tipo de óleo.

Cada processo ocorre em diferentes instantes a partir do início do vazamento, desde imediatamente após como até 1 ano depois, além de apresentarem diferentes durações (alguns duram horas e outros chegam a levar meses), como esta ilustrado na figura a seguir:



Figura 3: Importância relativa e evolução dos principais processos físico-químicos no tempo. A largura de cada faixa indica a importância do processo. Adaptado de ITOPF, 2002.

Nos primeiros instantes a área e a espessura da mancha são as propriedades físicas mais afetadas, e estas são variáveis fundamentais na modelagem de transporte e processos de óleo, uma vez que a área, por exemplo, é utilizada no cálculo da evaporação, processo que provoca mudanças na composição e no balanço de massa do óleo. Já a espessura da mancha de óleo é utilizada por muitos modelos no calculo da dispersão natural, importante na determinação do tempo de residência do óleo na superfície do mar. Além disso, as estimativas da espessura e área de uma mancha de óleo são importantes na adequação de métodos de contenção de vazamento e avaliação de impacto ambiental.

A seguir serão descritos os principais processos físico-químicos que atuam em uma mancha de óleo, apesar de terem sido implementados neste trabalho apenas dois destes processos (espalhamento e evaporação).

#### 5.1 Espalhamento

No instante em que o óleo é derramado em um corpo de água, a área da mancha sofre uma expansão devido à tendência que esta tem de escoar sobre si mesma, este fenômeno é chamado de espalhamento. Como pode ser visto na Figura 3, este processo é um dos mais atuantes nas primeiras horas após um vazamento e de grande importância, já que este afeta o transporte e os outros processos também, como por exemplo, a evaporação que é ligada diretamente à área da mancha.

Segundo Lair *et al.* (2001), a mancha de óleo logo que derramada no ambiente começa a espalhar-se, porém não uniformemente. A forma real que esta toma, depende de diversas variáveis externas, como por exemplo, qualquer força que atue na superfície pode causar uma ruptura, gerando um alongamento desta mancha, até mesmo um ligeiro vento pode causar um espessamento da mancha na direção contrária a do vento.

Nos instantes iniciais a mancha de óleo toma imediatamente uma forma afunilada, que apresenta uma região restrita de cor mais escura cercada por uma área reluzente de maior abrangência. A maior parte do óleo derramado está contida nesta região mais escura, que representa a parte espessa, e apenas uma pequena percentagem representa a área reluzente. Este formato que tenta representar mais realisticamente uma mancha de óleo, pode ser visto na figura a seguir:



Figura 4: Formato de uma mancha de óleo. Adaptado de ADIOS2.

Atualmente a maior parte dos algoritmos utilizados no cálculo do espalhamento foram baseados nas definições clássicas das equações desenvolvidas por Fay (1969), embora seja reconhecido que o espalhamento do óleo não pode ser explicado plenamente por essas equações, uma vez que foram deduzidas para situações teóricas, onde a mancha de óleo encontra-se em águas calmas, tomando um formato circular, que permanece inalterável ao decorrer do tempo.

Segundo Fay (1969), o espalhamento pode ser dividido em três fases onde as forças dominantes são: gravidade; tensão superficial; inércia; e viscosidade. Todas estas forças estão presentes nas três fases, porém para cada fase tem-se as forças predominantes, sendo que estas ocorrem em intervalos de tempo diferentes após o derrame de óleo, como pode ser visto na figuras a seguir:



Figura 5: Fases de um espalhamento de uma mancha de óleo. Adaptado de Doerffer (1992)

Imediatamente após o vazamento a espessura da mancha é importante e influencia no processo de espalhameó

Neste trabalho, por questões de otimização computacional, optou-se por implementar apenas a segunda fase do espalhamento, por ser esta a mais representativa. Para calcular esta fase foi implementada a formulação utilizada pelo programa ADIOS, que é uma modificação da fórmula de espalhamento gravitacional-vicosa de Fay (Fay, 1971). Esta fórmula incorpora o espalhamento induzido pelo vento de forma semi-empírica. Seguindo a sugestão de Ahlstrom (1975), o ADIOS utiliza uma aproximação numérica para o espalhamento representada através de um processo difusivo onde o coeficiente de difusão,  $D_{fay}$  é dado por:

$$D_{Fay} = \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$
(1.6)

onde Q é uma constante empírica adimensional,  $\frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w}$  é a densidade relativa do petróleo na água, g é a constante de aceleração gravitacional ,  $V_0$  é o volume inicial derramado,  $v_w$  é a viscosidade cinemática da água, e t é o tempo decorrido após o derrame.

No modelo ADOIL o coeficiente de espalhamento  $D_{fay}$  foi adicionado ao coeficiente de difusão da equação de advecção-difusão, tendo desta forma o espalhamento discretizado junto à difusão do modelo.

#### 5.2 Evaporação

O processo de evaporação é um dos mais importantes envolvido na remoção de uma mancha de óleo da superfície da água, e tem seu início logo após os primeiros instantes do vazamento. Quando o óleo é derramado, os componentes que possuem ponto de ebulição mais baixo (mais voláteis) são rapidamente volatilizados, reduzindo assim o volume e a massa da mancha que permanece na água. De acordo com a simulação feita no ADIOS (Figura 6), para os componentes do petróleo mais leves como a gasolina, mais de 90% de todo o combustível evapora antes da primeira hora, com as condições ambientais médias da Bacia de Campos.



Figura 6: Simulação da evaporação no ADIOS de dois tipos de gasolina, sob as condições ambientais aproximadas da bacia de campos, durante 5 dias.

A evaporação dos componentes mais voláteis aumenta a densidade e viscosidade da mancha de óleo, podendo os compostos mais pesados continuarem a sofrer outros processos como a emulsificação, com isso à medida que o óleo permanece na água sua evaporação diminui progressivamente. A taxa e extensão da evaporação depende de diversos fatores, tais como ponto de ebulição, área superficial e espessura da mancha, pressões de vapor do óleo e coeficiente de transferência de massa, que por sua vez dependem da composição do óleo, velocidade do vento, estado do mar e temperatura do ar e da água.

A seguir será apresentada uma descrição do processo de evaporação segundo a formulação proposta por Mackay *et al.*, 1980, que é uma das formulações mais utilizadas até hoje, e será implementada no modelo presente neste trabalho.

### • Relação do Volume de vapor

Segundo Mackay et al., 1980, o volume de vapor (m<sup>3</sup>) formado é dado por:

$$\Delta V = \mathbb{K}_{e} A \Delta t \tag{1.7}$$

onde K<sub>e</sub> é o coeficiente de transferência de massa (m/s), A é a área da mancha (m<sup>2</sup>) e  $\Delta t$ é o intervalo de tempo (s).

# • Coeficiente de Transferência de Massa

Seguindo as deduções de Mackay e Matsugu (1973) o coeficiente de transferência de massa  $K_h$  (m/h) é estimado em função da velocidade do vento U (m/h), do diâmetro da mancha X (m) e do número de Schmidt, *Sc*, como é mostrado a seguir:

$$K_{h} = 0.0292U^{0.78}X^{-0.11}Sc^{-0.67}$$
(1.8)

um valor razoável para Sc adotado na evaporação é de 2,7.

### • Relação da Taxa de Exposição

No estudo da taxa de exposição de uma mancha de óleo é útil analisar a relação entre exposição e fração remanescente de maneira a permitir sua implementação no

# ij**ŖŀŀŔŖĔŢŦſŀ**(Æj

)A a

#### $ANkrtmAHw \square$

1

ii EmBazh Patac DdrRZAqUolve

onde  $F_{vol}$  é fração volátil de hidrocarbonetos remanescentes; F é a fração remanescente;  $F_1$  é a fração de hidrocarbonetos inertes; E é a exposição (m<sup>3</sup>/kg); C é uma constante que é essencialmente a inclinação da curva de  $F_{vol}$  versus ln E; e B é a constante que corresponde a uma exposição muito pequena, momento no qual é assumido arbitrariamente um valor unitário para F (aproximadamente um minuto de evaporação). Um valor típico assumido para B é de 0,02, porém este valor depende da temperatura e do tipo de óleo. Esta equação pode ser reescrita em função da massa, volume ou fração remanescente.

Deve-se notar que inicialmente quando E é zero, F e  $F_{vol}$  apresentam um valor unitário, e o inverso ocorre quando E apresenta valores muito altos,  $F_{vol}$  tende a zero e Fse torna  $F_I$ , neste instante a evaporação está completa. Isso realmente ocorre quando:

$$E = B\{\exp(1/C) - 1\}$$
 (2.1)

Para óleo cru médio, um típico valor assumido para C é 0,06 para fração de massa e 0,065 para fração de volume, e um típico valor de B é 0,02.

Para alguns óleos compostos, a equação descrita anteriormente pode não ser adequada, então foi sugerido uma versão mais complexa:

$$F_{vol} = 1 - C_1 \ln((E+B)/B) - C_2 \{\ln((E+B)/B)\}^2 \dots - C_n \{\ln((E+B)/B)\}^2 \quad (2.2)$$

Esta equação oferece um método conveniente para incluir a evaporação em um modelo de óleo. Se em algum momento *t* após o espalhamento a fração remanescente é *F*, se torna necessário calcular o novo valor de fração remanescente  $(F + \Delta F)$  no instante  $(t + \Delta t)$ . A equação a seguir apresenta a diferenciação de *F* e *E* convertida em campos de diferenças finitas, isto é:

$$\Delta F = -\Delta EC (1 - F_I) / (E + B)$$
(2.3.1)

onde

$$\Delta E = KA\Delta t \tag{2.3.2}$$

O cálculo da área específica da mancha apresenta uma deficiência em relação ao valor correto de metro quadrado por quilograma devido à falta de informação de valores exatos da quantidade e área do óleo inicialmente derramado. A área especifica pode ser estimada das seguintes formas:

 $A=F_v / \{(espessura prevalecente da mancha (m)) (massa específica original do óleo <math>(kg/m^3))\}.$ 

ou

 $A=F_v / \{(área \ prevalecente \ da \ mancha \ (m^2)) \ (volume \ prevalecente \ da \ mancha \ (m^3)) \ (massa \ específica \ original \ do \ óleo \ (kg/m^2))\}.$ 

O coeficiente de transferência de massa e a área da mancha são variáveis ao decorrer do tempo, o que implica em uma alteração da taxa de exposição que pode ser calculado através de um reajuste na equação de *F*-*E*:

$$E = B\{\exp((1-F)/(1-F_I)C) - 1\}$$
(2.4)

Uma vez que  $\Delta E$  é calculado como o produto entre o coeficiente de transferência de massa, área específica e variação do tempo, teremos que  $\Delta F$  será calculado como:

$$\Delta F = -\Delta EC \left(1 - F_I\right) / (E + B) \tag{2.5}$$

Assim, teremos no decorrer do tempo a atualização de *F* como sendo  $(F + \Delta F)$ .

### 5.3 Dissolução

A presença de compostos solúveis em água nos hidrocarbonetos, permite que estes sejam dissolvidos instantes após o início do vazamento. No entanto, a dissolução é um processo que gera baixas perdas no balanço global de massa, já que estes compostos solúveis são os primeiros a serem perdidos por evaporação, um processo que é de 10 a 100 vezes mais rápido do que a dissolução (ITOPF, 2002).

A dissolução é um processo que depende diretamente da temperatura da água, da turbulência, e da superfície de contato entre o óleo e a água e é proporcional a área da mancha e a dispersão vertical do óleo na coluna de água. A dissolução pode ser prolongada ao decorrer do tempo na medida em que os processos de biodegradação e foto-oxidação passam a gerar subprodutos do óleo solúveis em água.

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

$$\frac{dDiss}{dt} = K_{d} \cdot f_{s} \cdot A_{s} \cdot S$$
(2.7)

onde  $\mathbb{K}_{d}$  é o coeficiente de transferência de massa por dissolução (um valor típico é 0.01 m/h);  $f_s$  é a fração de superfície coberta por óleo;  $A_s$  é a área da mancha de óleo (m2) e *S* é a solubilidade do óleo na água.

# 5.4 Emulsificação

Emulsificação é o processo onde ocorre a incorporação da água pelo óleo livre, gerando uma emulsão de diferente cor e consistência, que devido ao seu aspecto é chamada de '*mousse de chocolate*', vide figura a seguir:



Figura 7: Imagem de emulsão de água e óleo. Adaptado de ITOPF, 2002.

A emulsificação aumenta significativamente o volume da mancha de óleo, ao contrário da maioria dos outros processos que causam a perda de massa. Este processo dificulta a remoção do óleo derramado na água e aumenta a intensidade de outros processos como a foto-oxidação e biodegradação.

Este processo influencia a trajetória da mancha pelo fato de modificar as principais propriedades do óleo como a viscosidade e a massa específica. Esta relação pode ser vista na figura a seguir:



Figura 8: Relação da densidade (a) e viscosidade (b) com o tempo de exposição de uma mancha de óleo devido ao processo de emulsificação. Adaptado de Doeffer (1992).

Embora a emulsificação seja um dos principais processos que ocorre com o óleo, alguns modelos de trajetória não a levam em conta, devido a sua alta complexidade. A formulação proposta por Mackay *et al.*, (1980) é a mais utilizada pelos modelos que se propõe incorporar a emulsificação em seus algoritmos.

De acordo com a formulação proposta por Mackay *et al.,* (1980) a emulsificação pode ser parametrizada pela seguinte equação:

$$\frac{dF_{wv}}{dt} = K_{w} (1+W)^{2} \left(1 - \frac{F_{wv}}{F_{wv}^{f}}\right)$$
(2.8)

onde  $F_{wv}$  é a fração de volume de água incorporada na emulsão;  $K_w$  é uma constante empírica, com valores de  $1,0 \times 10^{-6}$  a  $2,0 \times 10^{-6}$  (s/m<sup>2</sup>); W é a velocidade do vento (m/s); e  $F_{wv}^{f}$  é a fração de volume final de água incorporada na emulsão.

# 5.5 Dispersão

A dispersão é um processo físico que distribue 9h M hÓmIB

A biodegradação é um processo que influencia pouco o balanço global de massa de óleo se comparada, por exemplo, com as perdas por evaporação ou dispersão, sobretudo nos primeiros dias após o derrame, uma vez que a biodegradação é um processo muito lento e que ocorre em pequena escala.

#### 5.7 Foto-oxidação

A foto-oxidação é um processo onde as moléculas dos hidrocarbonetos reagem com o oxigênio do ambiente através da ação da radiação ultravioleta do sol (fotólise), formando outros compostos solúveis que irão se dissolver na água, ou ainda outras substâncias mais persistentes e resistentes às alterações.

Segundo Paladino (2000), este processo ocorre preferencialmente na interface óleo-ar, sendo relativamente lenta, condicionada a quantidade de oxigênio que consegue penetrar na superfície da mancha de óleo. Outros fatores podem influenciar neste processo, tais como a espessura da mancha; a presença de sais minerais dissolvidos na água; presença de metais no óleo (como o vanádio), e quantidade de raios violeta.

A foto-oxidação é um processo relativamente pouco importante no balanço global de massa se comparado aos outros. Em algumas áreas com maior incidência de radiação (como o Ártico, no Verão) o processo de foto-oxidação poderá ser significativo.

#### 5.8 Sedimentação

Alguns produtos refinados do petróleo apresentam um peso específico maior que o da água doce e salobra, podendo estes sofrer sedimentação em rios, lagoas e estuários. Contudo a água do mar apresenta um peso específico superior a maioria dos tipos de petróleo, o que dificulta a sedimentação em ambiente marinho.

Nos oceanos é comum a presença de um material em suspensão (como sais, matéria orgânica, areia), e a adsorção de uma pequenas quantidade deste é suficiente para que o óleo atinja um peso específico superior ao da água do mar, possibilitando a sedimentação em ambiente marinho. A sedimentação ocorre mais com maior freqüência em águas rasas pelo fato destas apresentarem uma maior quantidade de material em suspensão.

# 6.0 Metodologia

Para resolver a equação governante do transporte aplicado ao óleo é necessário que esta seja discretizada no espaço e no tempo, implementando-se um método numérico, como exemplo o de diferenças finitas, elementos finitos e outros. Neste trabalho, descreve-se a resolução via diferenças finitas, aplicando-se o método numérico *Alternating-Direction Implicit - ADI*.

Para a escolha do método numérico mais adequado, foram testados 4 métodos: O método ADI clássico de Peaceman-Rachford (1955) e outros 3 métodos desenvolvidos neste trabalho originados de uma combinação do método ADI com o método de Takacs (1985), com o de Fromm (1968) e com o método Cuickest (Leonard , 1979).

Após a análise dos resultados destes testes (que podem ser vistos no item 7.3 do capítulo de resultados), o método ADI clássico de Peaceman-Rachford foi escolhido para ser aplicado no modelo desenvolvido neste trabalho.

A seguir será feita uma descrição do modelo ADOIL e uma descrição detalhada do método numérico ADI além de sua aplicação na discretização e resolução da equação de advecção-difusão. Uma descrição sucinta dos demais métodos testados se encontra no Anexo I.

#### 6.1 Descrição do modelo ADOIL

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo euleriano de transporte de óleo, o ADOIL, com a finalidade de analisar a física do transporte de uma mancha de óleo em um corpo de água.

O ADOIL é um modelo bidimensional que calcula o transporte da espessura de uma mancha de óleo (*C*), através da equação de advecção-difusão somada aos processos de espalhamento e evaporação do óleo, descrito na equação a seguir:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y}\right) + K\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right) + Espalhamento + Evaporação$$
(3.0)

As parametrizações adotadas para o espalhamento e para a evaporação foram descritas no capítulo 5 (5.1 e 5.2 respectivamente). A discretização da equação anterior
foi realizada através da implementação do método numérico semi-implícito ADI, o que será descrito mais detalhadamente nos próximos itens 6.2 e 6.3 deste capítulo.

O código deste modelo foi desenvolvido em FORTRAN 90, da forma mais simples possível, objetivando a fácil compreensão de seus usuários.

#### 6.2 O método Alternating-Direction Implicit - ADI

Segundo Fortuna 2000, O *Alternating-Direction Implicit - ADI* é um método numérico de diferenças finitas que adota uma discretização semi-implícita. Este é um método muito utilizado na solução de problemas onde a discretização de todos os termos implicitamente gera um custo computacional muito elevado.

Ao ser resolvida pelo ADI, a equação de advecção-difusão em duas dimensões gera duas matrizes tridiagonais, ao invés de uma matriz pentadiagonal, o que reduz consideravelmente o custo computacional.

O tratamento semi-implícito deste método numérico consiste na divisão de seu passo de tempo em duas etapas ( $t \rightarrow t + 1/2$  e  $t + 1/2 \rightarrow t + 1$ ), onde a cada  $\frac{1}{2}$  passo de tempo é resolvida implicitamente uma dimensão por vez, como pode ser observado no esquema a seguir:



Figura 9: Tratamento semi-implícito do método numérico ADI. Adaptado de Fortuna, 2000.

De acordo com a Figura 9, podemos observar que na primeira etapa da integração no tempo  $(t \rightarrow t + 1/2)$  a direção y é tratada de forma implícita e a direção x da forma explícita, já na segunda etapa  $(t + 1/2 \rightarrow t + 1)$  ocorre o contrário, trata-se a direção x da forma implícita e a direção y da forma explícita.

Seguindo a sequência de cálculo do método ADI, na primeira etapa da integração de tempo são resolvidas todas as colunas do domínio computacional e na segunda etapa são resolvidas todas as linhas (Figura 10).



Figura 10: Seqüência de cálculo do método ADI para a primeira (a) e segunda (b) etapa do passo de tempo. Adaptado de Fortuna, 2000.

Durante a resolução de cada coluna ou linha, é gerado um sistema de equações, que escrito de forma matricial, origina um sistema tridiagonal. Esta matriz de coeficientes pode ser resolvida por diferentes algoritmos, neste trabalho optou-se adotar o algoritmo de Gauss-Seidel.

### 6.3 Discretização da equação de advecção-difusão

A equação de advecção-difusão pode ser integrada no tempo pelo método explícito de Euler avançado e no espaço por Euler centrado, da seguinte forma:

$$\frac{C_{i,j}^{t+1} - C_{i,j}^{t}}{\Delta t} = -U\left(\frac{C_{i+1,j}^{t} - C_{i-1,j}^{t}}{2\Delta x}\right) - V\left(\frac{C_{i,j+1}^{t} - C_{i,j-1}^{t}}{2\Delta y}\right) + K\left(\frac{C_{i+1,j}^{t} - 2C_{i,j}^{t} + C_{i-1,j}^{t}}{\Delta x^{2}} + \frac{C_{i,j+1}^{t} - 2C_{i,j}^{t} + C_{i,j-1}^{t}}{\Delta y^{2}}\right)$$
(3.1)

Porém, estando discretizado desta forma (Equação 3.1), o modelo fica restrito à condições de estabilidade. Para torná-lo incondicionalmente estável é necessário que este seja discretizado implicitamente, para evitar elevados custos computacionais, optou-se neste trabalho em adotar o método semi-implícito ADI explicado no item anterior. A seguir será apresentada a discretização da equação governante do modelo (3.1) para as duas etapas de integração no tempo do método ADI de Peaceman-Rachford.

#### 6.3.1 Discretização do primeiro semi-intervalo de tempo ( $t \rightarrow t + 1/2$ )

Na primeira etapa da integração do tempo  $(t \rightarrow t + 1/2)$ , a direção y é tratada de forma implícita sendo aproximada para o nível de tempo t+1/2, e a direção x de forma explícita sendo aproximada para o nível de tempo t (vide Figura 9). Assim, teremos a equação 3.1 reescrita para a primeira etapa do passo de tempo na seguinte forma:

$$\frac{C_{i,j}^{t+1/2} - C_{i,j}^{t}}{\Delta t/2} = -U_{i,j}^{t} \left(\frac{C_{i+1,j}^{t} - C_{i-1,j}^{t}}{2\Delta x}\right) - V_{i,j}^{t+1/2} \left(\frac{C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j-1}^{t+1/2}}{2\Delta y}\right) \cdots$$

$$\cdots + K_{x} \left(\frac{C_{i+1,j}^{t} - 2C_{i,j}^{t} + C_{i-1,j}^{t}}{\Delta x^{2}}\right) + K_{y} \left(\frac{C_{i,j+1}^{t+1/2} - 2C_{i,j}^{t+1/2} + C_{i,j-1}^{t+1/2}}{\Delta y^{2}}\right)$$
(3.2)

ou

$$C_{i,j}^{t+1/2} - C_{i,j}^{t} = -U_{i,j}^{t} \frac{\Delta t}{4\Delta x} \Big( C_{i+1,j}^{t} - C_{i-1,j}^{t} \Big) - V_{i,j}^{t+1/2} \frac{\Delta t}{4\Delta y} \Big( C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j-1}^{t+1/2} \Big) \cdots$$

$$\cdots + K_{x} \frac{\Delta t}{2\Delta x^{2}} \Big( C_{i+1,j}^{t} - 2C_{i,j}^{t} + C_{i-1,j}^{t} \Big) + K_{y} \frac{\Delta t}{2\Delta y^{2}} \Big( C_{i,j+1}^{t+1/2} - 2C_{i,j}^{t+1/2} + C_{i,j-1}^{t+1/2} \Big)$$
(3.3)

Agrupando os termos em função das variáveis no tempo (t+1/2), a equação anterior pode ser reescrita sob a seguinte forma:

$$C_{i,j}^{t+1/2} + V_{i,j}^{t+1/2} A_{y} \Big( C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j-1}^{t+1/2} \Big) - D_{y} \Big( C_{i,j+1}^{t+1/2} - 2C_{i,j}^{t+1/2} + C_{i,j-1}^{t+1/2} \Big) = \cdots$$

$$\cdots \quad C_{i,j}^{t} - U_{i,j}^{t} A_{x} \Big( C_{i+1,j}^{t} - C_{i-1,j}^{t} \Big) + D_{x} \Big( C_{i+1,j}^{t} - 2C_{i,j}^{t} + C_{i-1,j}^{t} \Big)$$
(3.4)

onde:

$$A_{y} = \frac{\Delta t}{4\Delta y}; \qquad A_{x} = \frac{\Delta t}{4\Delta x}; \qquad D_{y} = \frac{K_{y}\Delta t}{2\Delta y^{2}}; \qquad D_{x} = \frac{K_{x}\Delta t}{2\Delta x^{2}}$$

Assim, evidenciando os coeficientes em termos do domínio espacial do problema, teremos que:

$$(1+2D_{y})C_{i,j}^{t+1/2} + (V_{i,j}^{t+1/2}.A_{y} - D_{y})C_{i,j+1}^{t+1/2} - (V_{i,j}^{t+1/2}.A_{y} + D_{y})C_{i,j-1}^{t+1/2} = \cdots$$
(3.5)  
$$\cdots (1-2D_{x})C_{i,j}^{t} + (-U_{i,j}^{t}.A_{x} + D_{x})C_{i+1,j}^{t} + (U_{i,j}^{t}.A_{x} + D_{x})C_{i-1,j}^{t}$$

## 6.3.2 Resolução das equações do primeiro semi-intervalo de tempo ( $t \rightarrow t + 1/2$ )

Tendo discretizado no tempo e no espaço a equação de advecção-difusão, o esquema ADI resolve para o 1º semi-intervalo de tempo  $(t \rightarrow t + 1/2)$ , um sistema de equações para cada coluna do domínio. Por exemplo, resolvendo uma coluna qualquer '*i*' composta pelas linhas j=2...n-1, teremos o seguinte sistema de equações (com base na equação 3.5):

$$(i,2) \qquad (1+2D_y)C_{i,2}^{t+1/2} + (V_{i,2}^{t+1/2}.A_y - D_y)C_{i,3}^{t+1/2} - (V_{i,2}^{t+1/2}.A_y + D_y)C_{i,1}^{t+1/2} = \cdots \\ \cdots (1-2D_x)C_{i,2}^t + (-U_{i,2}^t.A_x + D_x)C_{i+1,2}^t + (U_{i,2}^t.A_x + D_x)C_{i-1,2}^t$$

$$(i,3) \qquad (1+2D_y)C_{i,3}^{t+1/2} + (V_{i,3}^{t+1/2}.A_y - D_y)C_{i,4}^{t+1/2} - (V_{i,3}^{t+1/2}.A_y + D_y)C_{i,2}^{t+1/2} = \cdots \\ \cdots (1-2D_x)C_{i,3}^t + (-U_{i,3}^t.A_x + D_x)C_{i+1,3}^t + (U_{i,3}^t.A_x + D_x)C_{i-1,3}^t$$

$$(i,4) \qquad (1+2D_y)C_{i,4}^{t+1/2} + (V_{i,4}^{t+1/2}.A_y - D_y)C_{i,5}^{t+1/2} - (V_{i,4}^{t+1/2}.A_y + D_y)C_{i,3}^{t+1/2} = \cdots \\ \cdots (1-2D_x)C_{i,4}^t + (-U_{i,4}^t.A_x + D_x)C_{i+1,4}^t + (U_{i,4}^t.A_x + D_x)C_{i-1,4}^t \\ \vdots$$

$$(1+2D_y)C_{i,n-1}^{t+1/2} + (V_{i,n-1}^{t+1/2}.A_y - D_y)C_{i,n}^{t+1/2} - (V_{i,n-1}^{t+1/2}.A_y + D_y)C_{i,n-2}^{t+1/2} = \cdots$$
  
(*i*,*n-1*)  
$$\cdots (1-2D_x)C_{i,n-1}^t + (-U_{i,n-1}^t.A_x + D_x)C_{i+1,n-1}^t + (U_{i,n-1}^t.A_x + D_x)C_{i-1,n-1}^t$$

# Escrevendo o sistema anterior na forma matricial, teremos que:

$$\begin{bmatrix} A & C_{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_{2} & A & C_{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_{3} & A & C_{5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_{4} & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & C_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{n-2} & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{i,2}^{t+1/2} \\ C_{i,3}^{t+1/2} \\ C_{i,4}^{t+1/2} \\ C_{i,5}^{t+1/2} \\ \vdots \\ C_{i,n-1}^{t+1/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (D)C_{i,2}^{t} + (E_{2})C_{i+1,2}^{t} + (F_{2})C_{i-1,2}^{t} + cc_{1} \\ (D)C_{i,3}^{t} + (E_{3})C_{i+1,3}^{t} + (F_{3})C_{i-1,3}^{t} \\ (D)C_{i,5}^{t} + (E_{5})C_{i+1,5}^{t} + (F_{5})C_{i-1,5}^{t} \\ \vdots \\ (D)C_{i,n-2}^{t} + (E_{n-2})C_{i+1,n-2}^{t} + (F_{n-2})C_{i-1,n-2}^{t} \\ (D)C_{i,n-1}^{t} + (E_{n-1})C_{i+1,n-1}^{t} + (F_{n-1})C_{i-1,n-1}^{t} + cc_{n} \end{bmatrix}$$

onde:

$$\begin{split} B_{2} &= \left( V_{i,2}^{t+1/2} A_{y} - D_{y} \right) & C_{2} &= - \left( V_{i,2}^{t+1/2} A_{y} + D_{y} \right) & E_{2} &= \left( - U_{i,2}^{t} A_{x} + D_{x} \right) & F_{2} &= \left( U_{i,2}^{t} A_{x} + D_{x} \right) \\ &\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B_{n-1} &= \left( V_{i,n-1}^{t+1/2} A_{y} - D_{y} \right) & C_{n-1} &= - \left( V_{i,n-1}^{t+1/2} A_{y} + D_{y} \right) & E_{n-1} &= \left( - U_{i,n-1}^{t} A_{x} + D_{x} \right) & F_{n-1} &= \left( U_{i,n-1}^{t} A_{x} + D_{x} \right) \end{split}$$

Sendo:

$$A = (1 + 2D_y)$$
  

$$D = (1 - 2D_x)$$
  

$$cc_1 = -(C_2)C_{i,1}^{t+1/2} = \text{Condição de contorno pré-estabelecida para j=1}$$
  

$$cc_n = -(B_{n-1})C_{i,n}^{t+1/2} = \text{Condição de contorno pré-estabelecida para j=n}$$

Para resolver o sistema matricial anterior, neste trabalho foi utilizado o algoritmo de Gauss-Seidel. Após a aplicação do algoritmo, tem-se como resultado um vetor, que será nova coluna '*i*' a ser implementada no domínio para a segunda etapa do passo de tempo. O mesmo procedimento é repetido para as demais colunas até que se tenha todos os valores das novas colunas do domínio para a segunda etapa.

### 6.3.3 Discretização do segundo semi-intervalo de tempo $(t + 1/2 \rightarrow t+1)$

Na segunda etapa da integração do tempo  $(t + 1/2 \rightarrow t+1)$ , a direção *x* é tratada de forma implícita sendo aproximada para o nível de tempo t+1, e a direção *y* de forma explicita sendo aproximada para o nível de tempo t+1/2 (vide Figura 9). Desta forma, para a segunda etapa do passo de tempo, teremos a equação 3.1 reescrita como:

$$\frac{C_{i,j}^{t+1} - C_{i,j}^{t+1/2}}{\Delta t/2} = -U_{i,j}^{t+1} \left( \frac{C_{i+1,j}^{t+1} - C_{i-1,j}^{t+1}}{2\Delta x} \right) - V_{i,j}^{t+1/2} \left( \frac{C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j-1}^{t+1/2}}{2\Delta y} \right) \cdots$$

$$\cdots + K_x \left( \frac{C_{i+1,j}^{t+1} - 2C_{i,j}^{t+1} + C_{i-1,j}^{t+1}}{\Delta x^2} \right) + K_y \left( \frac{C_{i,j+1}^{t+1/2} - 2C_{i,j}^{t+1/2} + C_{i,j-1}^{t+1/2}}{\Delta y^2} \right)$$
(3.6)

ou

$$C_{i,j}^{t+1} - C_{i,j}^{t+1/2} = -U_{i,j}^{t+1} \frac{\Delta t}{4\Delta x} \left( C_{i+1,j}^{t+1} - C_{i-1,j}^{t+1} \right) - V_{i,j}^{t+1/2} \frac{\Delta t}{4\Delta y} \left( C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j-1}^{t+1/2} \right) \cdots$$

$$\cdots + K_x \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} \left( C_{i+1,j}^{t+1} - 2C_{i,j}^{t+1} + C_{i-1,j}^{t+1} \right) + K_y \frac{\Delta t}{2\Delta y^2} \left( C_{i,j+1}^{t+1/2} - 2C_{i,j}^{t+1/2} + C_{i,j-1}^{t+1/2} \right)$$
(3.7)

grupando os termos em função das variáveis no tempo (t+1), a equação 3.7 pode ser reescrita como:

$$C_{i,j}^{t+1} + U_{i,j}^{t+1} A_x \Big( C_{i+1,j}^{t+1} - C_{i-1,j}^{t+1} \Big) - D_x \Big( C_{i+1,j}^{t+1} - 2C_{i,j}^{t+1} + C_{i-1,j}^{t+1} \Big) = \cdots$$

$$\cdots \quad C_{i,j}^{t+1/2} - V_{i,j}^{t+1/2} A_y \Big( C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j-1}^{t+1/2} \Big) + D_y \Big( C_{i,j+1}^{t+1/2} - 2C_{i,j}^{t+1/2} + C_{i,j-1}^{t+1/2} \Big)$$
(3.8)

onde:

$$A_{y} = \frac{\Delta t}{4\Delta y}; \qquad A_{x} = \frac{\Delta t}{4\Delta x}; \qquad D_{y} = \frac{K_{y}\Delta t}{2\Delta y^{2}}; \qquad D_{x} = \frac{K_{x}\Delta t}{2\Delta x^{2}}$$

Colocando em evidência os coeficientes em termos do domínio espacial, a equação 3.8 pode ser reescrita sob a seguinte forma:

$$(1+2D_{x})C_{i,j}^{t+1} + (U_{i,j}^{t+1}.A_{x} - D_{x})C_{i+1,j}^{t+1} - (U_{i,j}^{t+1}.A_{x} + D_{x})C_{i-1,j}^{t+1} = \cdots$$

$$(3.9)$$

$$\cdots (1-2D_{y})C_{i,j}^{t+1/2} + (-V_{i,j}^{t+1/2}.A_{y} + D_{y})C_{i,j+1}^{t+1/2} + (V_{i,j}^{t+1/2}.A_{y} + D_{y})C_{i,j-1}^{t+1/2}$$

## 6.3.4 Resolução das equações do segundo semi-intervalo de tempo $(t + 1/2 \rightarrow t+1)$

Seguindo o raciocínio de cálculo do esquema ADI, para 2° semi-intervalo de tempo  $(t + 1/2 \rightarrow t+1)$ , será resolvido um sistema de equações para cada linha do domínio. Por exemplo, resolvendo uma linha qualquer 'j' composta pelas colunas i=2...n-1, teremos o seguinte sistema de equações (com base na equação 3.9):

(2,j) 
$$(1+2D_x)C_{2,j}^{t+1} + (U_{2,j}^{t+1}A_x - D_x)C_{3,j}^{t+1} - (U_{2,j}^{t+1}A_x + D_x)C_{1,j}^{t+1} = \cdots \\ \cdots (1-2D_y)C_{2,j}^{t+1/2} + (-V_{2,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{2,j+1}^{t+1/2} + (V_{2,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{2,j-1}^{t+1/2}$$

$$(3,j) \qquad (1+2D_x)C_{3,j}^{t+1} + (U_{3,j}^{t+1}A_x - D_x)C_{4,j}^{t+1} - (U_{3,j}^{t+1}A_x + D_x)C_{2,j}^{t+1} = \cdots \\ \cdots (1-2D_y)C_{3,j}^{t+1/2} + (-V_{3,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{3,j+1}^{t+1/2} + (V_{3,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{3,j-1}^{t+1/2}$$

$$(4,j) \qquad (1+2D_x)C_{4,j}^{t+1} + (U_{4,j}^{t+1}A_x - D_x)C_{5,j}^{t+1} - (U_{4,j}^{t+1}A_x + D_x)C_{3,j}^{t+1} = \cdots \\ \cdots (1-2D_y)C_{4,j}^{t+1/2} + (-V_{4,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{4,j+1}^{t+1/2} + (V_{4,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{4,j-1}^{t+1/2} \\ \vdots$$

$$(n-1,j) \qquad (1+2D_x)C_{n-1,j}^{t+1} + (U_{n-1,j}^{t+1}A_x - D_x)C_{n,j}^{t+1} - (U_{n-1,j}^{t+1}A_x + D_x)C_{n-2,j}^{t+1} = \cdots \\ \cdots (1-2D_y)C_{n-1,j}^{t+1/2} + (-V_{n-1,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{n-1,j+1}^{t+1/2} + (V_{n-1,j}^{t+1/2}A_y + D_y)C_{n-1,j+1}^{t+1/2}$$

# Escrevendo o sistema anterior na forma matricial, teremos que:

$$\begin{bmatrix} A & C_{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_{2} & A & C_{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_{3} & A & C_{5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_{4} & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & C_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{n-2} & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{2,j}^{t+1} \\ C_{3,j}^{t+1} \\ C_{4,j}^{t+1} \\ C_{4,j}^{t+1} \\ C_{5,j}^{t+1} \\ \vdots \\ C_{n-1,j}^{t+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (D)C_{2,j}^{t+1/2} + (E_{2})C_{2,j+1}^{t+1/2} + (F_{3})C_{3,j+1}^{t+1/2} + cC_{1} \\ (D)C_{3,j}^{t+1/2} + (E_{3})C_{3,j+1}^{t+1/2} + (F_{3})C_{3,j+1}^{t+1/2} \\ (D)C_{4,j}^{t+1/2} + (E_{4})C_{4,j+1}^{t+1/2} + (F_{4})C_{4,j-1}^{t+1/2} \\ (D)C_{4,j}^{t+1/2} + (E_{4})C_{4,j+1}^{t+1/2} + (F_{5})C_{5,j+1}^{t+1/2} \\ (D)C_{5,j}^{t+1/2} + (E_{5})C_{5,j+1}^{t+1/2} + (F_{5})C_{5,j+1}^{t+1/2} \\ \vdots \\ (D)C_{n-1,j}^{t+1/2} + (E_{n-2})C_{n-2,j+1}^{t+1/2} + (F_{n-2})C_{n-2,j+1}^{t+1/2} + (F_{n-1})C_{n-1,j+1}^{t+1/2} + cC_{n} \end{bmatrix}$$

onde:

$$B_{2} = \left(U_{2,j}^{t+1}A_{x} - D_{x}\right) \qquad C_{2} = -\left(U_{2,j}^{t+1}A_{x} + D_{x}\right) \qquad E_{2} = \left(-V_{2,j}^{t+1/2}A_{y} + D_{y}\right) \qquad F_{2} = \left(V_{2,j}^{t+1/2}A_{y} + D_{y}\right)$$
  

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$
  

$$B_{n-1} = \left(U_{n-1,j}^{t+1}A_{x} - D_{x}\right) \qquad C_{n-1} = -\left(U_{n-1,j}^{t+1}A_{x} + D_{x}\right) \qquad E_{n-1} = \left(-V_{n-1,j}^{t+1/2}A_{y} + D_{y}\right) \qquad F_{n-1} = \left(V_{n-1,j}^{t+1/2}A_{y} + D_{y}\right)$$

Sendo:

$$A = (1 + 2D_x)$$
  

$$D = (1 - 2D_y)$$
  

$$cc_1 = -(C_2)C_{1,j}^{t+1} = \text{Condição de contorno pré-estabelecida para i=1}$$
  

$$cc_n = -(B_{n-1})C_{n,j}^{t+1} = \text{Condição de contorno pré-estabelecida para i=n}$$

Resolvendo o sistema matricial anterior com o algoritmo de Gauss-Seidel, teremos como resultado uma linha, que será nova linha '*j*' a ser implementada no domínio para o passo de tempo seguinte. O mesmo procedimento é repetido para as demais linhas até que se tenha todos os valores das novas linhas do domínio para o próximo passo de tempo a ser resolvido. Realizando novamente as descrições feitas anterioriormente, será dada continuação à integração no tempo.

### 7.0 Experimentos e Resultados

Neste capítulo serão apresentados passo a passo todos os experimentos que foram realizados ao longo deste trabalho, que justificaram as escolhas tomadas a fim de validar o algoritmo deste modelo de transporte de mancha de óleo.

Todos os experimentos foram realizados em casos de controle hipotéticos, onde as forçantes do modelo, como as velocidades de corrente e vento, foram impostas a fim de controlar os cenários gerados, podendo assim validar separadamente, sem influências externas, a representação dos processos de advecção, difusão, espalhamento e volatilização de uma mancha de óleo pelo algoritmo deste modelo.

Em todos os experimentos foram avaliados a conservação de massa e a deformação da mancha (conservação do raio e simetria), ao longo do transporte em um corpo de água. Também foi avaliada a estabilidade numérica do método utilizado através condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

A seguir serão apresentadas a condição inicial e de contorno comum a todos os experimentos e os cenários que foram utilizados.

### 7.1 Condição Inicial e Condição de Contorno.

A seguir serão apresentadas as condições de iniciais e de contorno utilizadas nos experimentos deste trabalho durante o transporte de uma mancha de óleo em um corpo de água.

#### 7.1.1 Condição Inicial

A condição inicial adotada neste trabalho, para representar a distribuição inicial da espessura (*C*) de uma mancha de óleo, foi parametrizada pela seguinte equação:

$$C(x, y) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{raio} \varphi & para \ \varphi < raio \\ 0 & para \ \varphi \ge raio \end{cases}$$

onde  $\varphi = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2}$ 

onde x'e y' corresponde a localização do máximo de espessura da mancha, que para este trabalho foi adotado o valor de 0.1 metros.

A distribuição da espessura da mancha pode ser observada na figura a seguir:



Figura 11: Distribuição inicial da espessura de uma mancha de óleo

#### 7.1.2 Condição de Contorno

A condição de contorno para transporte de massa dos experimentos utilizada foi a condição radiacional proposta por Orlanski (1976), onde a velocidade de fase do movimento é calculada e imposta na fronteira, para que esta fique livre de reflexão. Esta condição radiacional pode ser descrita pela equação a seguir:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + C_p \frac{\partial\phi}{\partial x} = 0$$
(4.0)

onde  $\phi$  é qualquer variável e  $C_p$  sua velocidade de fase.

Aplicando esta condição de contorno na fronteira do modelo, podemos observar na Figura 12, que durante o transporte da mancha de óleo, não houve reflexão no instante em que esta passava pela fronteira.



Figura 12: Aplicação da condição de contorno de Orlanski para transporte de uma mancha de óleo através da fronteira do domínio.

#### 7.2 Cenários utilizados nos experimentos

A fim de testar a eficiência do algoritmo do modelo ADOIL no transporte da mancha de óleo, três cenários de controle foram estabelecidos para que os experimentos a seguir fossem padronizados. Nestes cenários foram aplicados campos de correntes permanentes e laminares, de forma que os resultados fossem gerados apenas pelo esquema numérico, sem que estes sofressem nenhum tipo de deformação causada pelo campo de correntes.

#### 7.2.1 Cenário 1: Canal Simples

O canal simples é um cenário que foi criado para analisar o algoritmo do modelo em um campo de correntes que fosse constante e laminar, o que possibilita a análise dos os resultados gerados apenas pelo esquema numérico, sem que estes sofressem nenhuma deformação causada pelo campo de correntes.

Este cenário consiste em um canal de 1200 metros de largura por 1200 metros de comprimento, com um campo de velocidade constante unidirecional (direção *x*) de 0.5 m/s de acordo com os vetores observados na Figura 13. O número de pontos utilizados para discretizar o domínio variou de acordo com a resolução espacial ( $\Delta_x e \Delta_y$ ) adotada no experimento em questão.



Figura 13: Transporte de uma mancha em um canal simples com campo de velocidade unidirecional.

Porém em determinados experimentos houve a necessidade de evitar qualquer influência da condição de contorno durante o transporte da mancha de óleo, para isso foi criado o segundo cenário, o canal cíclico.

## 7.2.2 Cenário 2 : Canal Cíclico

O canal cíclico apresenta as mesmas características que o canal simples, porém neste não existem fronteiras na direção *x*, ocorrendo o transporte da mancha de óleo ciclicamente pelo canal, conseqüentemente os efeitos da condição de contorno são eliminados. Além disto, o canal cíclico pode ser utilizado quando há a necessidade de um maior tempo de simulação sem que se tenha que expandir o domínio espacial.



Figura 14: Mancha sendo transportada em um canal cíclico

Podemos observar na Figura 14 que no momento em que a mancha atinge o fim do canal, sua fração que havia passado pela fronteira retoma imediatamente o início deste, não ocorrendo perda de massa, assim tornando o canal cíclico.

### 7.2.3 Cenário 3: Experimento de Molenkamp

No experimento proposto por Molenkamp (1968), diferentes métodos numéricos foram aplicados em um experimento de advecção de uma mancha, com o objetivo de analisar a eficiência de cada um na conservação de massa de constituintes advectada em um campo com fluxo de velocidade circular.

Após cada período de rotação, a mancha devia retornar a sua posição inicial sem mudanças na tpteque

um de circula de Épacalpci0, com

Pou**prápic**io ab□ ma numér Podand-foÉX mento o Fma que Neste trabalho, este cenário não foi utilizado para realizar uma comparação entre métodos numéricos diferentes, mas sim para analisar a eficiência do método ADI implementado no modelo ADOIL.

Previamente à escolha do método clássico ADI de Peaceman-Rachford, foram analisados junto a este, no cenário do canal simples, 3 outros métodos numéricos adaptativos ao ADI. Este experimento será descrito a seguir.

#### 7.3 Experimento realizado para analisar o método numérico mais adequado.

Ao escolher o método ADI para ser implementado neste modelo de transporte de óleo, houve o interesse de analisar outras versões deste método além da clássica de Peaceman-Rachford.

Pelo fato da versão clássica utilizar em sua formulação Euler centrado para discretizar o espaço, houve o interesse de adaptar outros métodos numéricos junto à formulação do ADI, que discretizassem o espaço de forma diferente.

Após adaptar os métodos de Fromm, de Takacs e o método Cuickest a formulação semi-implícita de <sup>1</sup>/<sub>2</sub> passo de tempo do ADI (ver Apêndice A), foi realizado um experimento com o objetivo de escolher o método numérico mais adequado e eficiente para resolver o problema de transporte de uma mancha de óleo em um corpo de água, julgando a advecção, a conservação de massa e deformação da mancha geradas pelo esquema numérico.

Neste experimento, foi utilizado o cenário 1 (canal simples) onde sua área foi discretizada no domínio computacional por uma grade de 200 linhas por 200 colunas, com intervalo espacial de 6m ( $\Delta x \in \Delta y$ ) e temporal de 12s ( $\Delta t$ ). Sendo a velocidade de 0,5 m/s este experimento teve o *CFL* =1 (*CFL*=*U*\* $\Delta t/\Delta x$ ).

A mancha de óleo que estava inicialmente no centro do canal foi advectada, sem levar em consideração a difusão, durante 50 integrações no tempo (600 s). Esta simulação foi realizada com os 4 diferentes métodos numéricos citados anteriormente, e a diferença entre os resultados gerados pelos métodos e a solução analítica, podem ser vistos na figura a seguir:



Figura 16: Diferença entre o campo final de espessura gerado pelos quatro métodos numéricos em relação a solução analítica.

Para análise da deformação da mancha, observa-se na Figura 16 que os métodos ADI-Fromm e ADI-Takacs ocasionaram um maior espalhamento da mancha de óleo na direção do movimento (direção *x*), pois apresentaram valores positivos na borda e negativo no centro do campo que representa a diferença entre o resultado gerado pelo do método e a solução analítica. Já os métodos ADI-Peaceman-Rachford e ADI-Cuickest mantiveram melhor a forma inicial da mancha, apesar de terem gerado uma pequena deformação devido à presença do ruído em torno da mancha (Figura 16).

Realizando um corte no perfil central da mancha na direção do eixo x (Figura 17), podemos melhor observar as descrições feitas anteriormente:



Figura 17: Perfil central da mancha após ser advectada durante 600s

Avaliando estes perfis, podemos confirmar que os métodos ADI-Fromm e ADI-Takacs causaram uma diminuição da espessura máxima da mancha e um aumento da base, caracterizando um espalhamento desta.

Já os métodos de ADI-Peaceman-Rachford e ADI-Cuickest apresentaram um perfil central semelhante, onde houve uma pequena redução da espessura máxima da mancha se comparados aos outros métodos, porém estes apresentaram um ruído na forma de uma onda contrária ao movimento, o que pode ser visto ao lado esquerdo do perfil central da mancha.

Após ter analisado a deformação da mancha introduzida pelos esquemas numéricos, outro fator importante a ser analisado é a advecção. Podemos observar na Figura 17, podemos observar que a posição dos perfis centrais no eixo x de todos os métodos, não apresentaram defasagem em relação a solução analítica (Perfil verde), com isso podemos afirmar que todos os quatro métodos resolveram com eficiência o processo de advecção de uma mancha de óleo em um corpo de água.

Por último, para analisar a conservação da massa da mancha de óleo ao longo da simulação, avaliaremos a razão entre (massa final/massa inicial) em porcentagem, de acordo com a figura a seguir:



Figura 18: Conservação de massa de uma mancha de óleo

Podemos verificar na Figura 18, que os métodos ADI-Fromm, ADI-Takacs e ADI-Cuickest apresentaram um aumento imediato de massa de aproximadamente 0.0027% e com este valor permaneceram até o final da simulação. Devido ao espalhamento que o ADI-Fromm causa na mancha, esta perde massa no final da simulação ao atingir a fronteira.

O método ADI-Peaceman-Rachford foi o que apresentou maior conservação de massa, ocasionando uma pequena perda de massa na ordem de 10<sup>-4</sup>.

Após terem sido avaliados os fatores anteriormente citados, conclui-se que os métodos ADI-Fromm e ADI-Takacs não se mostraram eficientes para o objetivo deste trabalho, pois estes causaram um espalhamento imediato e gradual da mancha de óleo, interferindo em seu formato.

Já os métodos de ADI-Peaceman-Rachford e ADI-Cuickest foram mais eficiente em relação a conservação da forma da mancha, e apesar de terem apresentado um ruído ao contrário do deslocamento da mancha, este não afetou o balanço de massa, pois os métodos resultaram em desvios da O  $(10^{-6})$  e O  $(10^{-3})$  na conservação de massa, respectivamente.

Como estes dois métodos de ADI-Peaceman-Rachford e ADI-Cuickest foram eficientes na resolução da advecção, na deformação da mancha e na conservação da massa, a escolha pelo ADI-Peaceman-Rachford para ser implementado no modelo ADOIL foi tomada pelo fato de que este apresentou um desvio da conservação da massa uma ordem de grandeza menor que o ADI-Cuickest, sendo então, este o método mais adequado e eficiente para o problema em questão.

# 7.4 Experimento realizado para definir o número de pontos necessários para discretizar uma mancha de óleo com eficiência no modelo ADOIL.

Uma vez definido o método numérico a ser utilizado, este experimento teve como objetivo obter o mínimo de pontos necessários para discretizar uma mancha de óleo com eficiência. Esta análise foi realizada estabelecendo-se uma relação entre o número de pontos discretizados e a conservação de massa (massa final/massa inicial) em porcentagem. Além disso, também foi analisada a relação com a deformação da mancha, onde o ruído gerado pelo esquema numérico foi avaliado através da razão entre a amplitude do ruído e amplitude máxima da mancha (espessura).

Neste teste utilizamos o cenário 3 (Molenkamp descrito no item 7.2.3), onde uma mancha de óleo com um raio de 150 metros foi advectada em um campo de velocidades radial até completar uma volta. O número de pontos utilizados para discretizar esta mancha variou de 5 a 40 pontos aumentando de 5 em 5. O domínio discreto estabelecido para cada simulação pode ser visto na tabela a seguir:

Número de pontos discretos do raio	Intervalo Espacial Δx e Δy (m)	Número de colunas e linhas do domínio espacial	Intervalo temporal ∆t (s)	Velocidade máxima (m/s) aplicada a mancha	Número de CFL (vel*Δt/Δx)
5	30	40	60	0,5	1
10	15	80	30	0,5	1
15	10	120	20	0,5	1
20	7,5	160	15	0,5	1
25	6	200	12	0,5	1
30	5	240	10	0,5	1
35	4	300	8	0,5	1
40	3,75	320	7,5	0,5	1

Tabela 1: Domínio computacional utilizado nas simulações para definição do número de pontos discretos a ser utilizado no raio de uma mancha de óleo.

Na Figura 19, podemos observar os campos finais de cada simulação com raios diferentes. Nota-se que quanto menos pontos discretos utilizados no raio, maior a deformação que a mancha sofre assim como maior o ruído em torno desta.



Figura 19: Transporte de uma mancha de óleo com diferentes números de pontos discretos para raio.

Realizando um corte no perfil central da mancha na direção y, podemos observar melhor a relação entre a deformação da mancha e o número de pontos discretos utilizados no raio. Estes perfis podem ser observados na figura a seguir:



Figura 20: Perfil central de manchas discretizadas por diferentes números de pontos de raio. O perfil em preto representa a distribuição inicial de espessura da mancha e o perfil em azul é após ter sido advectada até completar uma volta.

Nota-se na figura anterior, que quanto menor o número de pontos discretos do raio, maior o espalhamento da base do perfil e maior a perda de altura. A tendência observada é que com um aumento do número de pontos discretos, mais o perfil final (Azul) se aproxime do perfil inicial (Preto), reduzindo a deformação da mancha.

Na Figura 20 podemos observar ainda a presença de um ruído localizado a direita do perfil, que diminui de acordo com o aumento de número de pontos discretos do raio. Tal ruído, como foi visto no capítulo 7.3, é uma onda introduzida pelo esquema numérico, na direção oposta do movimento da mancha.

Apesar deste ruído não apresentar influências significativas no balanço de massa, este pode gerar uma cáustica no campo em torno da mancha, se esta for discretizada por um número pequeno de pontos. Este fato pode ser claramente observado na figura 19, para uma mancha com 5 pontos discretos no raio.

Para que uma análise consistente e um controle deste ruído fossem estabelecidos, foi criado o parâmetro de comparação ' $\zeta$ ', que é a amplitude do ruído relativa à amplitude máxima da mancha (espessura) dada por:

$$\zeta (\%) = \frac{Amplitude \ máxima \ do \ ruído}{Amplitude \ máxima \ da \ mancha} *100$$

A razão entre o parâmetro ' $\zeta$ ' e o número de pontos discretos utilizados no raio pode ser observada no gráfico a seguir:



Figura 21: análise da amplitude relativa do ruído com a variação do número de pontos discretos do raio.

Com base no gráfico anterior, podemos observar que a partir de 30 pontos discretos a amplitude relativa do ruído ( $\zeta$ ) tende a estabilizar com valores abaixo de 5%. A escolha do valor ideal do número de pontos utilizados para discretizar a mancha,

deve ser tomada em conjunto com a análise da conservação de massa, para que se tenha um valor que satisfaça ambos os critérios.

Assim, ao analisar a relação da conservação de massa com o número de pontos discretos utilizados no raio (Figura 22), podemos observar que, para todas as simulações, o desvio no balanço de massa obtido foi menor que 1,6 %, sendo que quanto maior o número de pontos discretos utilizado no raio, menor o desvio no balanço de massa.

No próximo experimento será analisada a condição de estabilidade do esquema numérico ADI, através da avaliação do critério de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

# 7.5 Experimento realizado para analisar a estabilidade numérica do modelo ADOIL a partir do número de CFL

Segundo Fernando (2004), o esquema numérico semi-implícito ADI de Peaceman-Rachford, também adotado no modelo ADOIL para a resolução da equação bidimensional de advecção-difusão, é incondicionalmente estável perante o teste de estabilidade de Von Neuman realizado pelo autor.

Com o objetivo de analisar o algoritmo do modelo ADOIL, e não só o esquema numérico, neste experimento foram realizadas simulações para verificar a influência do critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy na conservação de massa e na amplitude relativa do ruído. Desta forma, é possível estudar a dependência do modelo com o critério de CFL.

Para tal análise, foi realizado um teste onde uma mancha de 250m de diâmetro foi advectada durante 800 segundos no cenário 1 (canal simples), que apresenta um campo de corrente constante, unidirecional e laminar. Neste experimento foram realizadas 5 simulações com diferentes valores de CFL, que podem ser vistos na tabela a seguir, juntamente com suas demais configurações.

Número de pontos discretos do raio	Intervalo Espacial Δx e Δy (m)	Número de colunas e linhas do domínio espacial	Intervalo temporal Δt (s)	Velocidade (m/s)	Número de CFL (vel*Δt/Δx)
25	5	240	1	0,5	0,1
25	5	240	5	0,5	0,5
25	5	240	10	0,5	1
25	5	240	15	0,5	1,5
25	5	240	20	0,5	2

Tabela 2: Configuração computacional do experimento de estabilidade numérica

Podemos observar na Figura 23, que o modelo ADOIL apresentou um desvio no balanço de massa na ordem de 10<sup>-4</sup> para todos os valores de CFL testados, o que parece demonstrar, dado o baixo valor, a existência de conservação de massa independente do CFL.



Figura 23: Razão entre o critério de CFL e a conservação de massa de uma mancha de óleo, após ter sido advectada.

Juntamente ao critério de conservação de massa foi analisada a relação entre a amplitude relativa do ruído ' $\zeta$ ' e o número de CFL, com o objetivo de verificar a influência do CFL sobre a propagação do ruído no campo em torno da mancha. Os resultados desta análise podem ser vistos no gráfico a seguir:



Figura 24: Relação entre ' $\zeta$ ' e o número de CFL, após uma mancha ter sido advectada por 800 s.

Podemos observar no gráfico anterior que para todos os valores de CFL testados a amplitude relativa do ruído permaneceu abaixo de 5%, sem muitas oscilações, o que confirma o máximo aceitável de ruído imposto no experimento anterior em que se escolheu discretizar mancha de óleo com 25 pontos (Figura 21).

Após verificar a conservação de massa e a amplitude relativa do ruído, o modelo ADOIL aparenta ser independente do critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy, havendo a necessidade de que seja feita uma análise estatística mais criteriosa para que isso seja confirmado. Vale ressaltar que o passo de tempo a ser adotado no modelo para uma simulação, irá depender do campo de velocidade de correntes em questão, cujas variações devem ser bem representadas pela taxa amostral espaçotemporal, para que se tenha uma maior precisão dos resultados.

# 7.6 Experimento realizado para verificar a eficiência do modelo ADOIL na resolução de um problema de advecção pura.

Este experimento foi realizado para analisar a eficiência do modelo ADOIL em um problema de advecção pura. Neste teste uma mancha de óleo de 300m de diâmetro foi advectada até completar 1 volta no cenário 2 (canal cíclico) e no cenário 3 (Molenkanp). Em ambos os cenários a resolução espacial ( $\Delta x e \Delta y$ ) adotada foi de 6m, e a resolução temporal ( $\Delta t$ ) foi de 12 s. O intuito deste experimento foi verificar se após ter completado uma volta a mancha retornaria exatamente para o mesmo ponto.

#### 7.6.1 Utilizando o Cenário 2 (Canal Cíclico)

Os resultados deste teste podem ser vistos na Figura 25 onde são apresentados os campos de distribuição de espessura da mancha de óleo no momento inicial, intermediário e final desta simulação.



Figura 25: Transporte de uma mancha de óleo ao longo de um canal cíclico nos instantes inicial, intermediário (20 minutos) e final (40 minutos).

Podemos observar na figura anterior que a mancha não apresentou desvio visível na trajetória, e após ter completado uma volta, esta retornou para o ponto inicial de partida.

Ao realizar um corte no perfil central da mancha na direção x, é possível observar mais claramente a trajetória da mancha ao longo de seu transporte. Estes perfis podem ser vistos na figura a seguir:



Figura 26: Perfis centrais de uma mancha de óleo ao longo de seu transporte em um canal cíclico.

Nota-se na figura anterior, que apesar da deformação da mancha e a presença de ruído, os perfis inicial e final se sobrepõem, mostrando que a mancha retornou para sua posição inicial após ter completado uma volta.

Com base nestas avaliações, pode-se verificar que o modelo ADOIL realizou com eficiência a advecção de uma mancha em um canal cíclico com campo de velocidades unidirecional. Para verificar sua eficiência em um campo de velocidades mais complexo, será realizado o mesmo teste no cenário 3 (Molenkamp).

#### 7.6.2 Utilizando o Cenário 3 (Molenkamp)

Realizando este experimento no cenário 3 (Molenkamp), que apresenta um campo radial de velocidades, foi possível confirmar que o modelo ADOIL é eficiente na resolução do processo de advecção, pois ao observarmos a Figura 27 verificamos que a mancha realizou sua trajetória circular sem desvios.



Figura 27: Transporte de uma mancha de óleo ao longo de um campo de velocidades radial

Na figura anterior apresenta uma mancha de óleo durante sua trajetória circular em sentido anti-horário, em instantes diferentes. É possível constatar que apesar da deformação da mancha, esta realizou sua trajetória corretamente.

A sobreposição do campo inicial pelo campo final, pode ser verificada através de um corte no perfil central na direção *y* nestes instantes, conforme a figura a seguir:



Figura 28: Perfil central de uma mancha de óleo após ter completado uma volta no cenário 3.

Nota-se na figura anterior que o perfil final (Preto) após completar uma volta retoma a posição inicial (Azul), apesar de sua deformação. Com isso, foi possível confirmar juntamente com a simulação do item 7.6.1 que o modelo ADOIL é eficiente na resolução do processo de advecção.

# 7.7 Experimento realizado para analisar a eficiência do modelo ADOIL no processo de difusão pura.

Para este experimento foi utilizado o canal simples, porém com os campos de velocidade nulos, e com uma resolução espacial de 6m ( $\Delta x e \Delta y$ ) e resolução temporal de 12s ( $\Delta t$ ).

O Objetivo deste teste foi analisar a eficiência do ADOIL na resolução de um caso de difusão bidimensional pura. Para isto, uma mancha de 300m de diâmetro sofreu difusão, durante o período de 5 horas. Neste teste, foi adotado um valor arbitrário para do coeficiente de difusão de  $0.1 \text{m}^2/\text{s}$ .

Na figura a seguir podemos observar que a mancha apresentou após 5 horas de simulação, uma expansão simétrica de sua área ocasionada apenas pelo efeito de difusão pura, mediante a um campo de velocidades nulo.



Figura 29: Mancha de óleo com sua distribuição inicial de espessura e no momento final, após 5 horas sob o efeito do processo de difusão.

Podemos avaliar através da sobreposição do perfil central da mancha, em diferentes instantes ao longo de 5 horas, os efeitos da difusão na direção x (Figura 30) e na direção y (Figura 31).



Figura 30: Difusão na direção x durante um período 5 horas



Figura 31: Difusão na direção y durante um período de 5 horas.

Nota-se que tanto na direção x (Figura 30) quanto na direção y (Figura 31) há uma redução de altura do perfil (espessura da mancha) e um aumento de sua base, caracterizando um espalhamento simétrico da mancha, ocasionado pelo processo de difusão.

Com base nisso, foi possível verificar a eficiência do modelo ADOIL na resolução do processo de difusão pura de uma mancha de óleo em um corpo de água.

# 7.8 Experimento realizado para avaliar a resolução do modelo ADOIL no processo de advecção-difusão de uma mancha de óleo.

O objetivo deste experimento foi avaliar a eficiência do modelo ADOIL na resolução de um problema de advecção-difusão de uma mancha de óleo em um corpo de água.

Para realizar esta análise uma mancha de óleo de 400 m<sup>3</sup> foi transportada em um campo de velocidades radial, relativo ao cenário 3 (Molenkamp), cuja resolução espacial foi de 6m ( $\Delta x \in \Delta y$ ) e resolução temporal de 12s ( $\Delta t$ ).

Pelo fato do cenário 3 apresentar velocidades constantes no tempo (permanente), para que fossem evitadas deformações causadas pelo campo de velocidades, no momento em que no ADOIL foi calculado o coeficiente de difusão segundo a formulação proposta por Smagorinski (1963), os valores encontrados foram muito baixos, na ordem de  $10^{-8}$  m<sup>2</sup>/s. Por isso optou-se em adotar um valor arbitrário de 0,05 m<sup>2</sup>/s, para que os efeitos da difusão pudessem ser observados neste experimento.

Neste teste a mancha de óleo foi transportada até completar 10 voltas, e ao fim de cada volta foram avaliadas suas advecção e difusão, juntamente com a conservação de massa.

Na figura a seguir podemos visualizar a distribuição da espessura da mancha de óleo após ter completado 10 voltas no domínio. Observa-se que a mancha apesar de um pouco deformada por causa do ruído, retornou para a posição inicial e sofreu um espalhamento causado pela difusão.



Figura 32: Mancha de óleo após completar 10 voltas em um campo radial de velocidade sob o efeito do processo advectivo-difusivo.

Nota-se nas figuras 33 e 34, que através da sobreposição do perfil central da mancha na direção x e na direção y, foi possível verificar que a cada volta a mancha retomava aproximadamente para posição inicial, apresentando um pequeno desvio

devido aos erros de truncamento embutidos no cálculo do tempo necessário para completar uma volta, sofrendo um arredondamento no número de passos de tempo (número inteiro).



Figura 33: Sobreposição de diferentes instantes do perfil central da mancha na direção *x*, até completar 10 voltas sob o efeito de advecção-difusão.



Figura 34: Sobreposição de diferentes instantes do perfil central da mancha na direção *y*, até completar 10 voltas sob o efeito de advecção-difusão.

Nos perfis das figuras anteriores, observa-se que a mancha sofre uma difusão gradativa em ambas as direções (x e y). Porém é possível constatar na Figura 34, que o

efeito da difusão no lado direito do perfil não foi simétrico ao lado esquerdo, o que ocorre devido a presença do ruído (oposto à direção do movimento da mancha).

Observa-se no gráfico a seguir que após 16 horas de simulação o balanço de massa da mancha apresentou pequenos desvios entre 0,003 % à 0,02%, tendendo a estabilizar. Com isso, é possível confirmar a eficiência do modelo ADOIL para este experimento.



Figura 35: Análise da conservação de massa da mancha de óleo ao longo de 16 horas de simulação.

# 7.9 Experimento realizado para avaliar ao processo de espalhamento de uma mancha de óleo no modelo ADOIL.

O objetivo deste experimento foi avaliar separadamente o processo de espalhamento implementado no modelo ADOIL, que seguiu as formulações clássicas de Fay (1970) adaptadas por Ahlstrom (1975) e utilizada no modelo ADIOS. Uma melhor descrição deste processo foi feita no capítulo 5.1.

Neste experimento foi adotado o cenário 1, com resolução espacial de 6m ( $\Delta x = \Delta y$ ) e temporal de 12s ( $\Delta t$ ). O campo de velocidades estabelecido foi nulo, com a finalidade de avaliar apenas os efeitos do espalhamento sob uma mancha de óleo.

Para o cálculo do coeficiente de espalhamento  $D_{Fay}$  foram adotados os seguintes valores para suas variáveis:

$$D_{Fay} = \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

$$= \frac{Q^2}{16} \left( \frac{\rho_o - \rho_w}{\rho_w} \frac{gV_0^2}{\sqrt{v_w}} \right)^{1/3} \frac{1}{\sqrt{t}}$$

Com base nestes valores, o espalhamento de uma mancha de óleo de 400 m<sup>3</sup> foi calculado por um período de 10 dias, sendo possível observar na figura a seguir, os efeitos deste processo sob a distribuição de espessura da mancha.



Figura 36: Distribuição da espessura de uma mancha de óleo sob o efeito do processo de espalhamento.

Realizando um corte no perfil central da mancha na direção x (Figura 37) e na direção y (Figura 38), ao fim de cada dia, podemos visualizar claramente o efeito do espalhamento sob a mancha ao longo dos 10 dias de simulação.



Figura 37: Sobreposição de diferentes instantes do perfil central da mancha na direção x, até completar 10 dias sob o efeito do processo de espalhamento.



Figura 38:Sobreposição de diferentes instantes do perfil central da mancha na direção y, até completar 10 dias sob o efeito do processo de espalhamento.

Ao comparar a Figura 37 com a Figura 38, podemos constatar que o efeito do espalhamento ocorreu de forma simétrica, uma vez que ambos os perfis sofreram perda de altura e espalhamento da base, nas mesmas proporções. Nota-se que o efeito do
espalhamento é maior no primeiro dia e que este apresenta uma tendência a estabilizar ao longo da simulação.

Na Figura 39, podemos comparar o espalhamento da área de uma mancha de óleo resolvida pelo modelo ADOIL e calculada analiticamente pela formulação proposta por Mackay *et al.* 1980.



Figura 39: Espalhamento da área uma mancha de óleo ao decorrer de 10 dias.

No gráfico anterior, é possível observar que a formulação adotada no modelo ADOIL gerou um espalhamento subestimado em relação a formulação proposta por Mackay *et al.* 1980. Segundo Lehr *et al.* 2001, esta subestimação ocorre pelo fato de que a formulação adotada neste trabalho aproxima o espalhamento de Fay a um processo de difusão.

### 7.10 Experimento realizado para avaliar o processo de evaporação de uma mancha de óleo no modelo ADOIL.

Este experimento teve como objetivo avaliar eficiência do modelo ADOIL na resolução do processo de evaporação de uma mancha de óleo. Este processo foi implementado seguindo as formulações propostas por Mackay (1980) que foram descritas detalhadamente no capítulo 5.2.

Para esta simulação foi adotado o cenário 1, com resolução espacial de 6m ( $\Delta x e \Delta y$ ) e temporal de 12 s ( $\Delta t$ ). O campo de velocidades estabelecido foi nulo, com a finalidade de avaliar apenas os efeitos da evaporação sob uma mancha de óleo. As variáveis adotadas no calculo da evaporação tiveram os seguintes valores: a velocidade do vento foi de 4 m/s, a fração inerte foi 0,283, a massa específica do óleo de 880 kg/m<sup>3</sup> e o volume da mancha de 400 m<sup>3</sup>.

Depois de estabelecido todos os valores a serem utilizados na simulação, a evaporação da mancha foi calculada por um período de 24 horas, e os efeitos deste processo sob a distribuição da espessura da mancha pode ser constatado na figura a seguir:



Figura 40: Efeitos do processo de evaporação sob uma mancha de óleo por um período de 24 horas.

Podemos observar na figura anterior que há uma redução do volume da mancha de óleo mais intensa nas primeiras horas, e que a partir de 12 horas de simulação a evaporação da mancha tende a estabilizar. É possível visualizar mais claramente esses efeitos através de um corte no perfil central da mancha na direção x (Figura 41) e na direção y (Figura 42).



Figura 41: Sobreposição do perfil central na direção *x*, em diferentes instantes, ao longo de 24 de simulação da evaporação de uma mancha de óleo.



Figura 42: Sobreposição do perfil central na direção *y*, em diferentes instantes, ao longo de 24 de simulação da evaporação de uma mancha de óleo.

De acordo com os perfis anteriores, é possível constatar que o efeito da evaporação ocorreu em ambas as direções de forma simétrica, onde houve uma perda de

altura do perfil sem que sua forma fosse alterada (não houve espalhamento da base), devido à perda de volume causada pela evaporação.

A taxa de volume evaporado ao decorrer da simulação pode ser observada no gráfico a seguir, que apresenta para o mesmo experimento os resultados gerados pelo modelo ADOIL e os resultados calculados analiticamente através da formulação de Mackay *et al.*, 1980.



Figura 43: Evaporação de uma mancha de óleo ao longo de 24 horas. Os resultados em rosa foram gerados pelo modelo ADOIL e os resultados em azul foram calculados analiticamente com a formulação de Mackay *et al.*, 1980.

Observa-se no gráfico anterior que há uma perda de volume de 40% logo na primeira hora da simulação, e que os efeitos da evaporação diminuem ao decorrer do tempo, onde nas 23 horas seguintes a perda de volume apresentou uma tendência a estabilizar em torno de 70%.

Os resultados gerados pelo modelo ADOIL, foram semelhantes aos resultados obtidos analiticamente pela formulação proposta por Mackay (Figura 43), o que confirma a eficiência do deste modelo na resolução do processo evaporação de uma mancha de óleo em um corpo de água.

### 7.11 Experimento realizado para avaliar a interação entre os processos de espalhamento e evaporação no modelo ADOIL.

Este experimento objetivou a análise da interação entre processos de evaporação e espalhamento resolvidos no modelo ADOIL. Nesta simulação uma mancha de óleo foi submetida a ambos os processos por um período de 24 horas, seguindo as formulações adotadas nos itens anteriores (7.9 e 7.10).

A distribuição da espessura da mancha de óleo após o termino da simulação, pode ser visto na figura a seguir, que apresenta além do resultado desta simulação, o resultado para evaporação pura e para espalhamento puro, a fim de comparação.



Figura 44: Mancha de óleo após 24 de simulação de evaporação, espalhamento e ambos os processos.

Observa-se na figura anterior que quando a mancha de óleo é submetida aos processos de espalhamento e evaporação simultaneamente (último campo da figura 44), esta perde mais volume do que quando submetida somente a evaporação, porém esta sofre um menor espalhamento da área do que ao ser submetida somente ao processo de espalhamento.

As observações anteriores podem ser constatadas nos gráficos a seguir, que apresentam uma comparação da taxa de espalhamento (Figura 45) e da taxa de evaporação (Figura 46) para ambas as situações.



Figura 45: Taxa de espalhamento da área de uma mancha de óleo sob o efeito dos processos de evaporação e espalhamento, após 24 horas de simulação.

Verifica-se no gráfico anterior que o processo de evaporação reduz os efeitos do processo de espalhamento da área de aproximadamente 600% para 500%, o que ocorre pelo fato de que ao reduzir o volume, o processo de evaporação restringe o gradiente de espessura, que é um fator importante na intensidade do espalhamento. Com isso, verifica-se que a interação entre os processos de evaporação e espalhamento em relação a área da mancha ocorreu de forma esperada.

Em relação a taxa de volume evaporado, podemos observar na figura a seguir que ao submeter a mancha de óleo ao efeito dos dois processos simultaneamente, ocorre um aumento do volume evaporado, pois no momento em que o espalhamento amplia a área da mancha, este intensifica a evaporação ao disponibilizar uma maior área a ser evaporada.



Figura 46:Taxa de volume evaporado de uma mancha de óleo sob o efeito dos processos de evaporação e espalhamento, após 24 horas de simulação.

Pode-se verificar que as interações entre estes processos no modelo ADOIL ocorreram de forma coerente.

# 7.12 Experimento realizado para avaliar a eficiência do modelo ADOIL no transporte de uma mancha de óleo submetida a advecção-difusão e aos processos de evaporação e espalhamento.

Por fim, este experimento objetivou a análise da eficiência do modelo ADOIL na resolução do transporte de uma mancha de óleo submetida aos processos de advecçãodifusão, espalhamento e evaporação.

Para realizar este teste uma mancha de óleo de 400 m<sup>3</sup> foi transportada em um campo de velocidades radial, relativo ao cenário 3 (Molenkamp), cuja resolução espacial foi de 6m ( $\Delta x \ e \ \Delta y$ ) e resolução temporal de 12s ( $\Delta t$ ). Para os processos de espalhamento e evaporação estes seguiram a configuração estabelecida nos itens 7.9 e 7.10, respectivamente.

O cálculo do coeficiente de difusão foi baseado na formulação de Smagorinski (1963), que para este campo de velocidades adotado resultou em um coeficiente com baixos valores na ordem de 10<sup>-9</sup>, que foram utilizados mesmo assim, pois o objetivo deste experimento não foi o de estudar o efeito da difusão pura, mas sim o de todos os processos em conjunto devidamente escalados.

Nesta simulação a mancha foi transportada até completar 6 voltas no domínio, e na figura a seguir observa-se a distribuição de sua espessura a cada duas voltas.



Figura 47: Transporte de uma mancha de óleo sob o efeito de advecção-difusão, espalhamento e evaporação ao completar 2, 4 e 6 voltas.

É possível constatar que a mancha de óleo completa sua trajetória circular sem desvios, apesar da presença de ruído no campo em torno desta. Verifica-se também que a mancha sofre um espalhamento de sua área além de perder volume como pode ser visto no gráfico a seguir:



Figura 48: Volume evaporado de uma macha de óleo após completar 6 voltas no domínio.

Observa-se no gráfico anterior que a perda de volume tende a estabilizar em torno de 70% ao fim da simulação, que é o valor esperado a ser perdido por evaporação se for comparado com a Figura 46 do experimento 7.11.

Por tanto, o modelo ADOIL se mostrou eficiente no transporte advectivo-difusivo de uma mancha de óleo sob os efeitos dos processos de espalhamento e evaporação, apresentando apenas uma deformação na mancha de óleo causada pelo ruído presente em torno desta, sem que a conservação de massa fosse afetada.

#### 8.0 Discussão e Conclusão

Em grande parte dos vazamentos de óleo que ocorrem hoje em dia, não é fornecido com precisão características fundamentais sob o derramamento, como por exemplo: o volume total de óleo derramado; composição do óleo; velocidade do vento; temperatura do ar e da água no local do vazamento etc. A falta destas informações dificulta primeiramente o estudo e a modelagem do transporte de óleo no mar.

O trabalho apresentado teve como objetivo fundamental estudar o transporte de óleo no mar, visando o desenvolvimento de um modelo computacional capaz de gerar um prognóstico eficaz sob o comportamento e a trajetória do óleo derramado. Para alcançar este objetivo foi, primeiramente, apresentado um estudo dos processos físicos que estão presentes em um derramamento de óleo. Em seguida, baseando-se neste estudo foi proposto um modelo numérico, cuja equação governante foi a de advecçãodifusão.

Algumas adaptações do esquema numérico ADI foram testadas no item 7.3, e após ter sido analisado a deformação da mancha e conservação de massa ao longo do transporte, chegou-se a conclusão de que a versão clássica de Peaceman-Rachford do ADI foi a mais eficiente, tendo em vista que esta apresentou pouca deformação da mancha e a maior conservação de massa entre todas as versões testadas.

O ruído introduzido pelo ADI de Peaceman-Rachford, é causado pela instabilidade gerada por este, ao discretizar o espaço utilizando um esquema centrado. Neste trabalho, optou-se em aceitar a presença do ruído, uma vez que este não afetou a conservação de massa e apresentou uma amplitude relativa de no máximo 5 % em todos os experimentos.

No experimento 7.4 realizado para obter o menor número de pontos discretos capaz de representar com eficiência uma mancha de óleo, concluiu-se que independente do número de pontos adotado a conservação de massa manteve valores aceitáveis apresentando um desvio no balanço de massa de no máximo 1,6 % (Figura 22).

Após analisar a amplitude relativa do ruído na Figura 21, conclui-se que o valor de 25 pontos discretizou com eficiência o raio da mancha de óleo, porém a partir do momento em que foram implementados os processos de difusão e espalhamento, estes apresentaram certo controle sob à amplitude do ruído, possibilitando a utilização de menos pontos para discretizar o raio da mancha. Ao calcular as amplitudes relativas do ruído encontradas nos experimentos 7.6.2 (advecção pura) e da primeira volta do 7.12 (advecção-difusão com espalhamento e evaporação), foi possível verificar que para uma mancha com 25 pontos discretos de raio, houve uma redução da amplitude relativa do ruído de 4,4363 % para 2,6331 %, reduzindo quase pela metade. Por tanto, é possível que um número menor de pontos discretos de raio (< 25 pontos) possa resolver com eficiência o transporte da mancha, porém para encontrar um valor ideal, uma análise como a feita no experimento 7.4 teria que ser refeita.

Em relação a estabilidade e a dependência do modelo ADOIL com o critério de CFL, é necessário que um maior número de simulações sejam realizados de acordo com o experimento 7.5, e que seja feita uma análise numérica da estabilidade. Vale ressaltar que a resolução espacial e temporal a ser adotada no modelo, deve representar com eficiência as variações do campo de correntes, pois este é fundamental no transporte da mancha de óleo e está ligado diretamente com a precisão dos resultados.

Nos experimentos realizados para analisar os processos de espalhamento (7.9) e evaporação (7.10) concluiu-se que o modelo ADOIL apresentou resultados subestimados para o espalhamento, devido a formulação adotada, e para a evaporação resultados eficientes. Ao analisar interação destes processos (7.11), conclui-se que pelo fato da volatilização diminuir o gradiente de distribuição da espessura da mancha, este reduz o efeito do espalhamento (Figura 45), porém o espalhamento amplifica os efeitos da evaporação, ao ampliar a área da mancha.

Por tanto, após analisar cada processo separadamente e posteriormente os efeitos da interação entre eles, concluiu-se que o modelo ADOIL resolveu com eficiência o transporte advectivo-difusivo de uma mancha de óleo assim como os processos de espalhamento e a evaporação, com baixos custos computacionais, alcançando os objetivos propostos para este trabalho.

Para futuras implementações do modelo ADOIL, sugere-se que o código do modelo seja adaptado para ser aplicado em casos reais e não só em casos hipotéticos como foi realizado neste trabalho.

#### 9.0 Referências Bibliográficas

- AHLSTROM, S.W., 1975, A Mathematical Model for Predicting the Transport of Oil Slicks in Marine Waters. Battelle Pacific Northwest Laboratories, Richland, Wash., USA.
- AL-RABEH, A.H., LARDNER R.W., GUNAY N., 2000, "Gulfspill Version 2.0: a software package for oil spills in the Arabian Gulf", *Environmental Modelling & Software*, v.15, pp. 425-442.
- ALVES, F.N.A., 2006, Estudo do transporte de manchas de óleo por um modelo lagrangeano de partículas na Bacia de Pelotas. Dissertação de M.Sc., FURG, Rio Grande, RS, Brasil.
- BEEGLE-KRAUSE, C. J. GNOME: NOAA's Next-Generation Spill Trajectory Model. In: Oceans '99 MTS/IEEE, 1999, *Proceedings of MTS/IEEE*. Escondido, CA: MTS/IEEE Conference Committee. vol. 3, p.1262-1266.
- BENQUÉ, J. P., HAUGUEL, A., VIOLLET, P. L., 1982, "Engineering Application of Computational Hydraulics", *Pitman Advanced Publishing Program*, London, pp. 57-63.
- BORTHWICK, A. G. L., JOYNES, S. A., 1992, "Laboratory Study of Oil Slick Subjected to Nearshore Circulation", *Journal of Environmental Engineering*, v. 118, n. 6, pp. 905-922.
- BUCKMASTER, 1973 "Viscous-Gravity spreading of an oil slick", Journal of Fluid Mechanics, v. 59, n. 3, pp. 481 – 491.
- CASULLI V., CHENG, R. T., 1992, "Semi-Implicit Finite Difference Methods for Three Dimensional Shallow Water Flow", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 15, pp. 629-648.
- CHAO, X., SHANKAR N.J., CHEONG H.F., 2001, "Two- and three-dimensional oil spill model for coastal waters", *Ocean Engineering*, v. 28, pp. 1557-1573.
- COHEN, Y., MACKAY, D., SHIU, W.Y., 1980, "Mass transfer rates between oil slicks and water". The Canadian Journal of Chemical Engineering. v. 58.
- CUESTA, I., GRAU, F. X., GIRALT, F., 1990, "Numerical Simulation of Oil Spills in a Generalized Domain", Oil and Chemical Pollution, 7, pp. 143 159.
- DANIEL P., 1996. "Operational forecasting of oil spill drift at Météo-France", *Spill Science & Technology Bulletin.* v. 3, no <sup>1</sup>/<sub>2</sub>, pp. 53-64.

- DIPIETRO, N. D., HUH, C., COX, R. G., 1978, "The Hydrodynamics of the Spreading of One Liquid in the Surface of Another", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 81, n. 3, pp. 529 – 549.
- DOEFFER, J. W., 1992, "Oil Spill Response in the Marine Environment", *Pergamon Press.*, New York.
- FANNELOP, T. K., WALDMAN, G. D., 1971, "Dynamics of Oil Slicks", American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal, v. 10, n. 4, pp. 506 – 510.
- FAY, J. A., 1971, "Physical processes in the spread of oil on a water surface". In Proceedings of the Joint conference on Prevention and Control of Oil Spills, pp. 463-467.
- FAY, J. A., 1969, "The spread of oil slicks on a calm sea", Oil on the sea Plenum, New York, pp. 53 – 64.
- FERNANDEZ, R., 2001, Modelação de Derrames de Hidrocarbonetos, Trabalho Final de Curso, Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal.
- FERNANDO, H. J., 2004, Procedimentos Numéricos para a Solução das Equações da Advecção, da Difusão e Advecção-Difusão pelo Método das Diferenças Finitas, Dissertação de M.Sc., COPPE/URFJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- FORTUNA, A. O., 2000, Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações, Editora da USP – Edusp.
- FROMM, J.E., 1968, "A method for reducing dispersion in convective difference schemes", J. Comput. Phys., v. 3, pp. 176-189.
- GNOME, 2002. *User's Manual*. Office of Response and Restoration. Hazardours Materials Response Division. National Oceanic and Atmospheric Administration.
- HESS, K. W., Kerr, C. L., 1979, "A Model to Forecast the Motion of Oil on the Sea", *Proceedings of the Oil Spill Conference*, pp 653-663.
- HOULT, D. P., 1972, Oil spreading on the Sea. Ann. Rev. Fluid Mech., ed. M. Van Dyke. W. Vincenti & J. Wehausen. Annual Reviews. Inc. Palo Alto, CA. pp. 341-368.
- ITOPF, 2002, Effects of Marine Oil Spills Technical Information Paper, The International Tanker Owners Pollution Federation.
- LEHR, W. et al., 2001, "Revisions of the ADIOS oil spill model", Environmental Modelling & Software, v. 17, pp. 191-199.

LEONARD B.P., 1979. A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 19, pp. 59-98.

#### LIMAÉD<sup>1</sup>/2004ÉORRSÉSTARE, OBIAGOSO, MARI3 MARTINELLI, M.R., MEHDI, N. <sup>n</sup> GÉROR <sup>2001</sup>, OIT spill study at Baia de Guanabara, Brazil". In: *Proceedings of OMAE-*20<sup>th</sup> International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering.

MAÉKIAMUD., BUIST, I., MASCARENAS, R. e PATERSON, S., 1980, Oil Spilods m n



- SMAGORINSKI, J., 1963. "General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiments". *Monthly Weather Review*, v. 91, pp. 99–164.
- TAKACS,L.L., 1985, "A Two-Step Scheme for the Advection Equation with Minimized Dissipation and Dispersion Erros", *Monthly Weather Review*, v. 113, pp. 150-165.
- TKALICH, P., HUDA, M.K., GIN, K.Y.H., 2003, "A Multiphase Oil Spill Model". Journal of Hydraulic Research, v. 41, n. 2, pp. 115-125.

#### Apêndice A. Métodos numéricos testados no modelo ADOIL

#### A1- Método Numérico originado a partir de uma combinação entre o método ADI e o método de Fromm

O método de Fromm (1968), conhecido por ser de segunda ordem e erro de fase zero para a advecção, e é baseado em uma combinação linear dos métodos Lax-Wendroff (1960) e o Upwind, a fim de obter uma redução considerável do erro dispersivo. Seu algoritmo é representado pela equação a seguir:

$$C_{i,j}^{t+1} = C_{i,j}^{t} - U \frac{\Delta t}{4\Delta x} \Big( C_{i+1,j}^{t} + 3C_{i,j}^{t} - 5C_{i-1,j}^{t} + C_{i-2,j}^{t} \Big) - V \frac{\Delta t}{4\Delta y} \Big( C_{i,j+1}^{t} + 3C_{i,j}^{t} - 5C_{i,j-1}^{t} + C_{i,j-2}^{t} \Big) \\ + U^{2} \frac{\Delta t^{2}}{4\Delta x^{2}} \Big( C_{i+1,j}^{t} - C_{i,j}^{t} - C_{i-1,j}^{t} + C_{i-2,j}^{t} \Big) + V^{2} \frac{\Delta t^{2}}{4\Delta y^{2}} \Big( C_{i,j+1}^{t} - C_{i,j}^{t} - C_{i,j+1}^{t} + C_{i,j-2}^{t} \Big)$$
(A.1)

A equação anterior foi adaptada para a formulação do método ADI de dois semiintervalos de tempo, originando duas novas equações este novo método adaptado:

$$\frac{\left|1^{\circ} passo \quad \left(t \to t + 1/2\right)\right|}{C_{i,j}^{t+1/2} + V \frac{\Delta t}{8\Delta y} \left(C_{i,j+1}^{t+1/2} + 3C_{i,j}^{t+1/2} - 5C_{i,j-1}^{t+1/2} + C_{i,j-2}^{t+1/2}\right) - V^{2} \frac{\Delta t^{2}}{8\Delta y^{2}} \left(C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j}^{t+1/2} - C_{i,j+1}^{t+1/2} + C_{i,j-2}^{t+1/2}\right) =$$

$$C_{i,j}^{t} - U \frac{\Delta t}{8\Delta x} \left(C_{i+1,j}^{t} + 3C_{i,j}^{t} - 5C_{i-1,j}^{t} + C_{i-2,j}^{t}\right) + U^{2} \frac{\Delta t^{2}}{8\Delta x^{2}} \left(C_{i+1,j}^{t} - C_{i,j}^{t} - C_{i-1,j}^{t} + C_{i-2,j}^{t}\right)$$
(A.2)

$$\frac{\left|2^{\circ} passo \left(t+1/2 \rightarrow t+1\right)\right|}{C_{i,j}^{t+1} + U \frac{\Delta t}{8\Delta x} \left(C_{i+1,j}^{t+1} + 3C_{i,j}^{t+1} - 5C_{i-1,j}^{t+1} + C_{i-2,j}^{t+1}\right) - U^{2} \frac{\Delta t^{2}}{8\Delta x^{2}} \left(C_{i+1,j}^{t+1} - C_{i,j}^{t+1} - C_{i-1,j}^{t+1} + C_{i-2,j}^{t+1}\right) =$$

$$C_{i,j}^{t+1/2} - V \frac{\Delta t}{8\Delta y} \left(C_{i,j+1}^{t+1/2} + 3C_{i,j}^{t+1/2} - 5C_{i,j-1}^{t+1/2} + C_{i,j-2}^{t+1/2}\right) + V^{2} \frac{\Delta t^{2}}{8\Delta y^{2}} \left(C_{i,j+1}^{t+1/2} - C_{i,j}^{t+1/2} - C_{i,j+1}^{t+1/2} + C_{i,j-2}^{t+1/2}\right)$$
(A.3)

### A2- Método Numérico originado de uma combinação entre o método ADI e o étodo de Tacaks

O método de Tacaks (1985) é explícito de terceira ordem no espaço, e seu algoritmo pode ser observado na equação a seguir:

$$C_{ij}^{u_{1}} = C_{i,j}^{u_{1}} - \frac{4x}{2} (C_{i,j,j}^{u_{1}} - C_{i,j}^{u_{1}}) + \frac{4x^{2}}{2} (C_{i,j,j}^{u_{1}} - 2C_{i,j}^{u_{1}} + C_{i,j,j}^{u_{1}}) + \theta_{j} A_{j}(A_{j} - C_{j,j}^{u_{1}}) - \theta_{j} A_{j}(A_{j} - C_{j,j}^{u_{1}}) - \theta_{j} A_{j}(A_{j} - C_{j,j}^{u_{1}}) - \theta_{j} A_{j}(A_{j} - C_{j,j}^{u_{1}}) + \theta_{j}^{u_{1}} + \frac{4x^{2}}{6}$$

$$Onde, \quad Ax = U \frac{h}{h_{x}}, \quad Ay = V \frac{h}{h_{y}}, \quad \theta_{x} = \frac{(1 + Ax)}{6}, \quad \theta_{y} = \frac{(1 + Ay)}{6}$$

$$(Para - aptar este método ao ADI foi necessário que sua equação fosse discritizada e dois semi-intervalos de tempo, originando duas novas equações:
$$(\frac{|v_{passo} - (v - v - 1/2)|}{(C_{y}^{u_{1}} + \frac{Ay^{2}}{2}(C_{y,i}^{u_{1}} - C_{y,i}^{u_{2}}) + \frac{Ay^{2}}{2}(C_{y,i}^{u_{1}} - 2C_{y,i}^{u_{2}} + C_{y,i}^{u_{2}}) + \theta_{y}A_{i}A_{i}A_{i} - 0|C_{i,j}^{u_{2}} - 3C_{i,j}^{u_{2}} - 3C_{i,j}^{u_{2}} - 3C_{i,j}^{u_{2}} - 3C_{i,j}^{u_{2}} + C_{i,j}^{u_{2}}) + (A.5)$$

$$(A.5)$$

$$(-(C_{j}^{u_{1}}) + \frac{Ay^{2}}{2}(C_{i,j} - 2U_{i}^{u_{1}} + U_{i,j}^{u_{2}}) + \theta_{x}A_{i}A_{i}A_{i} - 0|C_{i,j}^{u_{2}} - 3U_{i,j}^{u_{2}} + 3C_{i,j}^{u_{2}} - C_{i,j}^{u_{2}}) + (A.5)$$

$$(-(C_{j}^{u_{1}}) + \frac{Ay^{2}}{2}(C_{i,j} - 2U_{i,j}^{u_{2}} - V_{i,j}^{u_{1}}) + \theta_{x}A_{i}A_{i}A_{i} - 0|C_{i,j}^{u_{2}} - 3U_{i,j}^{u_{2}} - C_{i,j}^{u_{2}}) + (A.5)$$

$$(-(C_{j}^{u_{1}}) + \frac{Ay^{2}}{2}(C_{i,j} - 2U_{i,j}^{u_{2}} - V_{i,j}^{u_{2}}) + (-(U_{i,j}^{u_{2}} - 3U_{i,j}^{u_{2}} - 2U_{i,j}^{u_{2}}) + (-(U_{i,j}^{u_{2}} - 3U_{i,j}^{u_{2}}) + (-(U_{i,j}^{u_{2}} - 3$$$$

+

#### A3- Método Numérico originado a partir de uma combinação entre o método ADI e o método de Cuickest

O método Cuikest (Cubic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms) de Lenard (1979), utiliza interpolação cúbica *upstream*. A formulação deste esquema está representada na equação a seguir:

$$C_{i,j}^{t+1} = C_{i,j}^{t} - U_{i,j} \frac{\Delta t}{6\Delta x} adu - V_{i,j} \frac{\Delta t}{6\Delta y} adv + K_x \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left( C_{i+1,j}^{t} - 2C_{i,j}^{t} + C_{i-1,j}^{t} \right) + K_y \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \left( C_{i,j+1}^{t} - 2C_{i,j}^{t} + C_{i,j-1}^{t} \right)$$
(A.7)

Sendo que os valores de *adu* e *adv* da equação anterior são modificados de acordo com o sinal da velocidade da corrente:

• Para valores de u>0  $adu = C_{i-2,j}^{t} - 6C_{i-1,j}^{t} + 3C_{i,j}^{t} + 2C_{i+1,j}^{t}$ • Para valores de u<0  $adu = -C_{i+2,j}^{t} - 2C_{i-1,j}^{t} - 3C_{i,j}^{t} + 6C_{i+1,j}^{t}$ • Para valores de v>0  $adv = C_{i,j-2}^{t} - 6C_{i,j-1}^{t} + 3C_{i,j}^{t} + 2C_{i,j+1}^{t}$ • Para valores de v<0  $adv = -C_{i,j+2}^{t} - 2C_{i,j-1}^{t} - 3C_{i,j}^{t} + 6C_{i,j+1}^{t}$ 

Mantendo a relação de *adu* e *adv* citada anteriormente e adaptando este método ao esquema ADI, temos que a equação A.7 é discretizada novamente em dois semiintervalos de tempo, originando duas novas equações:

## Livros Grátis

(<u>http://www.livrosgratis.com.br</u>)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração Baixar livros de Agronomia Baixar livros de Arquitetura Baixar livros de Artes Baixar livros de Astronomia Baixar livros de Biologia Geral Baixar livros de Ciência da Computação Baixar livros de Ciência da Informação Baixar livros de Ciência Política Baixar livros de Ciências da Saúde Baixar livros de Comunicação Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE Baixar livros de Defesa civil Baixar livros de Direito Baixar livros de Direitos humanos Baixar livros de Economia Baixar livros de Economia Doméstica Baixar livros de Educação Baixar livros de Educação - Trânsito Baixar livros de Educação Física Baixar livros de Engenharia Aeroespacial Baixar livros de Farmácia Baixar livros de Filosofia Baixar livros de Física Baixar livros de Geociências Baixar livros de Geografia Baixar livros de História Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura Baixar livros de Literatura de Cordel Baixar livros de Literatura Infantil Baixar livros de Matemática Baixar livros de Medicina Baixar livros de Medicina Veterinária Baixar livros de Meio Ambiente Baixar livros de Meteorologia Baixar Monografias e TCC Baixar livros Multidisciplinar Baixar livros de Música Baixar livros de Psicologia Baixar livros de Química Baixar livros de Saúde Coletiva Baixar livros de Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo