

ModelRia

<u>Model</u>ação da qualidade da água da laguna da <u>Ria</u> de Aveiro

POCTI/CTA/10219/98

Relatório Final



Universidade de Aveiro Centro das Zonas Costeiras e do Mar



Instituto Superior Técnico

Centro de Ambiente e tecnologias Marítimos



Hidromod

Junho de 2003

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	1
I. SISTEMA MOHID	3
1. Hidrodinâmica	4
2. Advecção-Difusão	5
3. Transporte de Sedimentos	5
4. Qualidade da Água	6
4.1. Nutrientes	8
4.2. Temperatura	9
4.3. Luz	9
II. IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO	11
1. Simulação na Ria de Aveiro	11
2. Condições Iniciais	14
3. Condições Fronteira	15
4. Descargas na Ria de Aveiro	16
4.1. Localização das Descargas	16
4.2. Caracterização das Descargas	17
4.2.1. Rio Vouga	18
4.2.2. Rio Antuã	20
4.2.3. Rio Caster	21
4.2.4. Rio Boco	22
4.2.5. Valas de Drenagem	23
4.2.6. Quantificação Relativa das Descargas	24
III. HIDRODINÂMICA DO SISTEMA	27
1. Circulação Transiente	27
2. Circulação Residual	31
3. Tempo de Residência	34

IV. MODELAÇÃO ECOLÓGICA	43
1. Distribuição Espacial das Propriedades	43
2. Análise das Séries Temporais	47
3. Análise dos Valores Médios Anuais	59
4. Fluxos Anuais entre Zonas	65
5. Balanço Global de Azoto na Ria de Aveiro	66
V. FERRAMENTA WEBGIS PARA GESTÃO DE DADOS	68
CONCLUSÕES	71
ANEXO I – SISTEMA DE MODELOS MOHID	74
ANEXO II – DEFINIÇÃO DAS CAIXAS DE INTEGRAÇÃO	74
ANEXO III – QUANTIFICAÇÃO DAS DESCARGAS NA RIA DE AVEIRO	74

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 – Ciclo do Azoto no meio marinho	9
Figura 2 – Batimetria da Ria de Aveiro	12
Figura 3 – Malha considerada na simulação da qualidade da água na Ria de Aveiro	12
Figura 4 – Caixas de integração consideradas para a Ria de Aveiro.	13
Figura 5 – Descargas na Ria de Aveiro.	16
Figura 6 – Variação sazonal da descarga do Rio Vouga.	19
Figura 7 - Variação sazonal da descarga do Rio Antuã	20
Figura 8 - Variação sazonal da descarga do Rio Caster.	21
Figura 9 - Variação sazonal da descarga do Rio Boco.	22
Figura 10 – Contribuição relativa das descargas na primeira fase do ano mediano.	25
Figura 11 - Contribuição relativa das descargas na segunda e quarta fases do ano mediano	26
Figura 12 - Contribuição relativa das descargas na terceira fase do ano mediano	26
Figura 13 – Campo de velocidade em situação de enchente durante a Maré Viva	28
Figura 14 - Campo de velocidade em situação de enchente durante a Maré Viva (interior)	29
Figura 15- Campo de velocidade em situação de vazante durante a Maré Viva (interior)	29
Figura 16 – Campo de velocidade em situação de enchente durante a Maré Morta (interior)	30
Figura 17 – Campo de velocidade em situação de vazante durante a Maré Morta (interior)	30
Figura 18 – Fluxo residual na Ria de Aveiro	32
Figura 19 – Fluxo residual na Ria de Aveiro (Zona Central).	32
Figura 20 – Fluxo residual na Ria de Aveiro (Canal de Principal e Canal de Ilhavo)	33
Figura 21 – Fluxo residual na Ria de Aveiro (Zona da Embocadura).	33
Figura 22 – Variação do volume de água no interior da Ria de Aveiro durante o período de simulação.	35
Figura 23 - Distribuição inicial das partículas lagrangeanas na Ria de Aveiro.	36
Figura 24 - Distribuição das partículas após 10 dias de simulação.	37
Figura 25 - Distribuição das partículas após 20 dias de simulação.	37
Figura 26 - Evolução da fracção de partículas lagrangeanas no interior do estuário	38
Figura 27 - Troca de água entre caixas após 5 dias de simulação.	41
Figura 28 - Troca de água entre caixas após 10 dias de simulação.	42
Figura 29 - Troca de água entre caixas após 20 dias de simulação.	42
Figura 30 - Distribuição espacial média de fitoplâncton no mês de Maio (COM e SEM macroalgas)	44
Figura 31 - Distribuição espacial média de amónia no mês de Maio (COM e SEM macroalgas)	44
Figura 32 - Distribuição espacial média de nitrato no mês de Maio (COM e SEM macroalgas)	44
Figura 33- Distribuição espacial média de Sedimentos no mês de Maio (COM e SEM macroalgas)	46
Figura 34 – Distribuição espacial das macroalgas após 4 anos de simulação	46

rigura 55 – Evolução incula anual das propriedades na Ria de Aveno (Com e Selvi Macioalgas).
Figura 36 - Evolução média anual de Fitoplâncton e Zooplâncton na Ria de Aveiro (COM e SEM
Macroalgas)
Figura 37 – Evolução da concentração de macroalgas (kg/m2) ao longo de três anos consecutivos50
Figura 38 - Evolução anual dos factores limitantes do crescimento das macroalgas50
Figura 39 - Evolução anual dos factores limitantes do crescimento do fitoplâncton(COM e SEM
macroalgas)
Figura 40 – Estações de amostragem (ModelRia) utilizadas para a validação dos resultados do MOHID.52
Figura 41 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR1 (Petrogal)53
Figura 42 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR2 (Espinheiro)
Figura 43 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR3 (Murtosa)
Figura 44 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR5 (Moranzel)
Figura 45 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR6 (Vista Alegre)
Figura 46 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR7 (Vagueira)
Figura 47 – Estações de amostragem utilizadas para a validação dos resultados do MOHID60
Figura 48 - Concentração média anual de fitoplâncton obtida pelo modelo vs. medidas de campo
registadas60
Figura 49 - Concentração média anual de zooplâncton obtida pelo modelo vs. medidas de campo
registadas61
Figura 50 - Concentração média anual de amónia obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.61
Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62
Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.
Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas
 Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas62 Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Condições iniciais para a simulação da qualidade da água na Ria de Aveiro	14
Tabela 2 – Características da fronteira marítima.	15
Tabela 3 – Quantificação da descarga do Rio Vouga	19
Tabela 4 - Quantificação da descarga do Rio Antuã.	20
Tabela 5 - Quantificação da descarga do Rio Caster.	22
Tabela 6 - Quantificação da descarga do Rio Boco	23
Tabela 7 - Quantificação da descarga das valas de drenagem no Canal de Mira.	24
Tabela 8 – Descargas de água doce na simulação dos processos hidrodinâmicos	27

INTRODUÇÃO

A qualidade da água da Ria de Aveiro, como em qualquer outro sistema, surge como o resultado da conjugação de diversos factores, pelo que seu estudo deve implicar uma análise, mais ou menos pormenorizada (dependendo dos objectivos concretos), dos processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no sistema. Os processos físicos são aliás, aqueles que condicionam em grande medida a extensão dos restantes, uma vez que são os responsáveis pelo transporte da água e esta constitui o meio onde a maior parte dos processos de desenrola. Neste sentido, a modelação ecológica da Ria de Aveiro requer a simulação matemática dum grande número de processos, englobando e interligando diferentes áreas do conhecimento.

A Ria de Aveiro é caracterizada pela existência do chamado *moliço*, vulgarmente utilizado como fertilizante nos terrenos agrícolas. O *moliço* é constituído por uma mistura de plantas vasculares marinhas (maioritariamente *Potamogeton pectinatus, Ruppia cirrhosa* e *Zostera moltii*) e algas (*Gracilaria verrucosa, Ulva sp., Enteromoroha sp.* e *Lola lúbrica*) e a sua exploração foi assumida, em tempos, como uma das principais actividades económicas da região, atendendo ao grande número de trabalhadores dependentes unicamente desta actividade. A existência de *moliço* no interior da Ria de Aveiro não pode ser desprezado quando se pretende estudar a qualidade da água na Ria de Aveiro, pois além do papel económico terá também um papel importante no sistema ecológico. É neste contexto que se considera como principal objectivo deste estudo, compreender até que ponto é determinante para o sistema ecológico a existência de mais do que um produtor primário de biomassa na Ria de Aveiro.

A concretização deste objectivo só é possível utilizando a modelação ecológica como ferramenta base, interligando-a com valores de campo obtidos através de campanhas de amostragem realizadas na Ria de Aveiro. O sistema MOHID surge como uma

ferramenta apropriada para a modelação ecológica na Ria de Aveiro permitindo simular, não só os principais processos físicos mas também, processos químicos e biológicos que ocorrem num meio aquático. A aplicação do sistema MOHID não permite, ainda, a consideração de plantas com raízes e por essa razão considera-se apenas a existência de macroalgas, tratando-se, assim, de uma aproximação.

De forma a cumprir o objectivo proposto são considerados os resultados de duas simulações da aplicação do Sistema MOHID à Ria de Aveiro: a primeira considera o fitoplâncton como único produtor primário de biomassa (SEM macroalgas) e a segunda simulação considera a existência, não só de fitoplâncton mas também, de macroalgas (COM macroalgas). Através da comparação dos resultados obtidos nas duas simulações é possível concluir acerca da influência das macroalgas no sistema ecológico da ria. A análise dos resultados baseia-se então, na comparação de valores de concentração e fluxos de massa de várias propriedades, calculadas pelo modelo, analisando tanto a sua evolução anual, como também a sua distribuição espacial no interior da Ria.

I. Sistema MOHID

O sistema de modelos MOHID foi desenvolvido usando uma estratégia de orientação por objectos e todas as potencialidades do FORTRAN 95. Encontra-se organizado em módulos que, embora distintos, se interligam de forma a determinar os resultados pretendidos. Em traços gerais o sistema calcula a evolução de dois tipos de propriedades: as **propriedades hidrodinâmicas**, onde se incluem as velocidades, nível da água, fluxos de água e viscosidade turbulenta e as **propriedades da água**, tais como a salinidade, temperatura, densidade, nutrientes, matéria em suspensão, fitoplâncton, zooplâncton e, mais recentemente, as macroalgas. Para o cálculo destas propriedades, o modelo baseia-se no conceito de volume finito, sendo as equações aplicadas macroscopicamente a cada volume de controlo, isto é, a cada célula da malha, sob forma de um fluxo divergente, garantindo-se assim a conservação no transporte das propriedades (Adcroft *et al.*, 1997 in Pina, 2001).

O MOHID considera que o ecossistema que pretende simular é delimitado por fronteiras que podem corresponder a cinco diferentes situações: **superfície livre**, em contacto com a atmosfera; **fundo**, onde são considerados fenómenos como a compactação do solo, tensão de corte e erosão/deposição de sedimentos; **fronteiras laterais abertas**, onde são consideradas as trocas com o mar; **fronteiras laterais fechadas**, que podem ser **fixas ou móveis** (estas últimas com posição variável no tempo, que correspondem às células que podem ficar a descoberto da água dependendo da maré). Para o caso das fronteiras laterais fechadas, fixas ou móveis, considera-se que o fluxo existente é sempre nulo, sendo as trocas entre a terra e a água, como é o caso de um rio, consideradas como descargas.

O MOHID possui uma interface gráfica, que simplifica a utilização do sistema. O seu funcionamento está dividido em três partes distintas: *Pre-processing*, relativo à aquisição e fornecimento dos dados; *Execution of the model*, a execução dos cálculos

propriamente dita e *Post-processing*, permitindo a exploração e interpretação dos resultados.

Os resultados do modelo podem ser visualizados em dois formatos distintos, dependendo do tipo de estudo que se pretende desenvolver: séries temporais de valores obtidos para determinadas células e resultados na forma matricial, usando o Hierarchical Data Format (HDF), desenvolvido pelo National Center of Supercomputing Applications (NCSA).

Descrevem-se de seguida as características gerais dos principais módulos do sistema MOHID utilizados na modelação ecológica da Ria de Aveiro, englobando uma descrição geral dos principais processos envolvidos. No Anexo I encontra-se uma descrição técnica do MOHID, onde são aprofundadas as considerações e aproximações utilizadas na construção do modelo.

1. Hidrodinâmica

O Módulo Hidrodinâmico pode ser visto como o primeiro na complexa cascata de modelos que compõem o sistema MOHID. Trata-se de um modelo hidrodinâmico tridimensional que resolve as equações primitivas baseadas nas equações de Navier-Stokes, em coordenadas cartesianas para escoamentos incompressíveis, considerando as aproximações de Boussinesq e Hidrostática.

O modelo é formulado no método da aproximação por volumes finitos, com uma discretização vertical genérica, que permite a implementação simultânea de vários tipos de coordenadas verticais.

A maré surge como uma condição fronteira que, introduzida nas células correspondentes à fronteira marinha, alteram a elevação da superfície livre, propagandose depois, através da equação da continuidade para as restantes células. O sistema permite ainda a utilização de um ficheiro hidrodinâmico, contendo a informação do campo de velocidades calculado pelo modelo em determinada simulação e que pode ser lido e repetido em simulações de longa duração, evitando deste modo o cálculo hidrodinâmico. Esta metodologia permite a redução significativa do tempo de cálculo para cada simulação.

2. Advecção-Difusão

Partindo do campo de velocidades e também dos coeficientes de difusão turbulenta, calculados pelo modelo hidrodinâmico, o modelo "transporta" as propriedades, incluindo a temperatura e salinidade, aplicando a equação de advecção-difusão para uma propriedade que se desloca no seio de um fluido em movimento. O modelo considera ainda a existência de um efeito baroclínico responsável por uma variação da densidade da água, que por sua vez depende da variação da salinidade e temperatura.

3. Transporte de Sedimentos

Para o estudo da produção primária, a determinação da concentração de sedimentos em cada célula é fundamental, pois desta depende o factor de extinção da luz na água, que influencia a quantidade de luz disponível para a actividade fotossintética dos organismos.

A determinação da concentração de sedimentos presente em cada célula é conseguida através da aplicação da equação de advecção-difusão, onde a advecção vertical inclui a velocidade de sedimentação das partículas, dependente dos processos de floculação a que os sedimentos coesivos estão sujeitos. Neste modelo assume-se que, apesar do

processo contínuo de formação/destruição dos flocos, dentro de cada volume de controlo, a distribuição dos sedimentos por tamanho permanece constante, não sendo necessária a adição de termos relativos à produção e decaimento, podendo assumir-se que os sedimentos suspensos se comportam de forma conservativa.

Considera-se, neste estudo, um valor de 1×10^{-7} m/s para a velocidade de queda das propriedades particuladas (incluindo sedimentos), constante ao longo do tempo e em todo o domínio. Este é um valor bastante baixo, quando comparado com 1×10^{-4} m/s referenciados na literatura, mas permite reproduzir de forma bastante satisfatória o efeito conjunto de alguns processos que não foram explicitamente simulados. As simulações efectuadas incluem explicitamente o efeito das correntes sob a tensão de corte no fundo, mas o mesmo efeito provocado pela existência de ondas não é contabilizado, uma vez que implicaria um estudo adicional, de forma a detectar não só as zonas de formação de ondas, mas também as suas principais características (altura e frequência).

4. Qualidade da Água

O modelo de qualidade da água, considerado como o topo do sistema, permite calcular o termo relativo às fontes e poços específicos para cada propriedade fundamental, em cada uma das células da malha e em cada instante.

As fontes e poços associados a cada propriedade dependem dos processos químicos e biológicos em que estão envolvidos e encontram-se associados aos ciclos biogeoquímicos do Carbono, Azoto e Fósforo.

Executar o módulo de qualidade da água implica executar os modelos precedentes: em cada instante, o modelo hidrodinâmico simula as elevações da superfície livre e as velocidades do fluído (água) necessárias ao cálculo dos termos de advecção-difusão; conjugando o transporte com as reacções químicas e biológicas na coluna de água,

simuladas neste módulo, obtém-se, na mesma malha de cálculo, a distribuição espacial dos parâmetros de qualidade da água. O modelo encontra-se preparado para fornecer em cada célula da malha o valor da concentração de azoto (na forma de amónia, nitrato, nitrito, azoto orgânico dissolvido refractário, ou não, (DONr e DONnr), e azoto orgânico particulado), fósforo orgânico e inorgânico, oxigénio dissolvido e ainda fitoplâncton, zooplâncton e, mais recentemente macroalgas.

Considera-se no modelo que existem três factores responsáveis pela limitação da actividade fotossintética dos organismos, tanto do fitoplâncton como das macroalgas: nutrientes, temperatura e intensidade da luz.

Os processos envolvendo o fitoplâncton e as macroalgas são semelhantes, uma vez que se tratam de organismos fotossintéticos, diferindo apenas na parametrização considerada. A única diferença entre os organismos reside na capacidade de as macroalgas se fixarem a um substrato no fundo da coluna de água, permanecendo assim no interior da Ria, ao contrário do fitoplâncton que é "arrastado" pela água. As áreas de estabelecimento das macroalgas são definidas no modelo com base no conceito de tensão de corte crítica: se a tensão de corte criada pela velocidade da água for maior do que um determinado valor crítico (neste caso 1 Pascal) então, as macroalgas serão quebradas e "arrastadas" pela água (passando a sua biomassa a ser considerada como PON); se a tensão de corte for inferior ao valor crítico então, as macroalgas permanecem no mesmo local e crescerão dependendo da disponibilidade de nutrientes. Da mesma forma, a concentração de macroalgas num determinado local encontra-se também dependente dos fluxos de deposição de sedimentos, ao considerar-se um fluxo máximo de deposição para a existência de macroalgas.

Apresentam-se de seguida algumas considerações relativas aos factores limitantes do crescimento dos organismos devido aos nutrientes, temperatura e luz.

4.1. Nutrientes

Os nutrientes e os seus sais são os compostos que, juntamente com o dióxido de carbono são absorvidos pelas algas para constituir novo material orgânico. Desempenham, pois, um papel muito importante no crescimento dos produtores primários. A sua ausência implica graves desequilíbrios no ciclo de vida, podendo levar à morte os organismos (Boney, 1975).

Estudos efectuados revelam a importância do fósforo e azoto como os principais nutrientes limitantes do crescimento do fitoplâncton e macroalgas, sendo o azoto aquele que em ecossistemas estuarinos e costeiros se considera o principal elemento limitativo do crescimento (Portela, 1996). O fósforo é um elemento muito necessário ao desenvolvimento dos produtores primários, assimilado na forma de ortofosfatos (PO₄⁻³, HPO₄⁻², H₂PO₄⁻). No entanto, uma vez que este elemento existe em grande abundância nos ecossistemas estuarinos e marítimos, a sua importância é significativamente menor, relativamente a um ecossistema de água doce (Portela, 1996).

Considera-se que o azoto pode ser assimilado pelos produtores primários (fitoplâncton e macroalgas) nas formas de amónia (NH_4^+) e nitrato (NO_3^-) , embora seja considerada uma preferência pelo consumo de amónia, devido ao facto de esta ser uma espécie mais reactiva. A utilização de nitrato implica uma conversão em amoníaco, o que representa para os organismos um gasto de energia (Portela, 1996). Apesar desta preferência, que faz com que a amónia seja rapidamente consumida dentro do sistema, esta persiste no meio marinho, embora em pequenas concentrações, uma vez que este é o principal produto de excreção dos organismos aquáticos. Estas inter-relações entre o ciclo do azoto e o ciclo de vida dos produtores primários são evidenciadas na figura seguinte, Figura 1.



Figura 1 – Ciclo do Azoto no meio marinho.

4.2. Temperatura

A temperatura tem no crescimento dos produtores primários uma influência muito significativa, influenciando as taxas metabólicas do organismo em causa. Desta forma, este é também um factor limitante do crescimento, tanto para o fitoplâncton como para as macroalgas.

4.3. Luz

A actividade metabólica dos produtores primários baseia-se num processo fotossintético, dependendo directamente da intensidade de energia solar que atinge os organismos e da sua capacidade de captação. Assim, a luz é também um factor limitante do crescimento. A energia solar de que os organismos necessitam para desencadear a produção primária é, desde a sua origem, sujeita a uma série de fenómenos até se

encontrar disponível. Fenómenos tais como a reflexão, absorção e propagação através da atmosfera, que dependem da quantidade de nuvens e poeiras existentes, influenciam a quantidade que atinge a superfície da água. Na superfície da água, dependendo do ângulo de incidência dos raios solares, da posição geográfica do local e da declinação solar, que por sua vez varia para as diferentes horas do dia e para diferentes dias, uma porção de luz é reflectida de novo para a atmosfera, sendo outra porção sujeita a refracção ao penetrar num meio diferente. Dentro da água, existe um fenómeno de extinção da luz, o que significa que esta ao propagar-se sofre uma atenuação vertical. Esta atenuação resulta por um lado, da absorção da luz pela água e, por outro, devido aos obstáculos presentes na coluna de água, tais como outros organismos fotossintéticos, partículas suspensas e compostos solúveis.

Em conclusão, a intensidade de luz solar que pode, realmente, ser utilizada pelos produtores primários é uma pequena fracção do total de energia primária que atinge a superfície da água. O fitoplâncton tem, durante o dia, preferência pelas camadas superfíciais da coluna de água. O factor de extinção da luz para este organismo é dependente da própria concentração de fitoplâncton (auto-ensombreamento). Para as macroalgas, que se encontram fixas no fundo da coluna de água, a quantidade de luz disponível depende, não só da concentração de fitoplâncton que se encontra nas camadas superficiais, mas também pode ser atenuada pelo efeito de sombra que as próprias algas podem provocar umas nas outras, dependendo da sua concentração. Com intensidade de luz suficiente para desencadear a fotossíntese, a eficiência deste processo depende, agora, da reacção do fitoplâncton e das macroalgas à luz e, em particular, da sua capacidade de captação e eficiência na utilização da energia, que se encontra

II. Implementação do Modelo

1. Simulação na Ria de Aveiro

A Figura 2 representa a batimetria utilizada para a zona da Ria de Aveiro. Grande parte do interior da Ria apresenta uma cota acima do zero hidrográfico, correspondendo às chamadas zonas intertidais, que se encontram cobertas de água apenas em determinados períodos do ciclo de maré e que são caracterizados pela existência de sapal. A simulação dos processos hidrodinâmicos na Ria de Aveiro é feita utilizando uma malha constituída por 326×318 células com um espacamento que varia entre 50 e 250 m. A resolução desta malha permite simular os principais processos hidrodinâmicos que ocorrem na Ria de Aveiro, mas para os processos ecológicos a sua utilização deixa de ser eficiente. A simulação dos processos ecológicos requer longos períodos de simulação, pelo menos um ano, o que em termos de tempo de cálculo do modelo se traduz em semanas. Neste sentido, opta-se por utilizar, na simulação da qualidade da água na Ria de Aveiro, uma malha mais grosseira, que resulta da integração da malha fina (4×4 células), constituída por 81×79 células, que permite a simulação de um ano em cerca de um dia e meio, utilizando um processador de 2 GHz. No relatório preliminar do projecto ModelRia é feita uma descrição detalhada do processo de integração.

A Figura 3 representa a malha utilizada nas simulações da qualidade da água, onde o tamanho das células é variável no espaço, ou seja, consideram-se células de menores dimensões na zona interior da Ria de Aveiro e células maiores nas áreas adjacentes. A malha utilizada neste estudo é descentrada, isto é, as propriedades escalares são calculadas no centro da célula e as velocidades e fluxos calculados nas suas faces. O uso de uma malha descentrada permite uma solução fisicamente mais realista e facilita a imposição das condições fronteira.



Figura 2 – Batimetria da Ria de Aveiro.



Figura 3 – Malha considerada na simulação da qualidade da água na Ria de Aveiro.

O tipo de formato utilizado para a visualização dos resultados do modelo depende da análise pretendida e, neste estudo, opta-se por aplicar o conceito de Caixas de Integração, já utilizado em estudos anteriores, por se considerar que estas permitem uma mais adequada representação dos resultados, facilitando a percepção dos processos envolvidos. A aplicação deste conceito consiste em agrupar células pertencentes a zonas específicas do estuário, caracterizadas quer pela sua localização, quer pela sua função no ecossistema. Em cada uma destas áreas é calculada uma média da concentração da propriedade, utilizando os valores calculados em cada célula. Desta forma, é possível, não só caracterizar determinadas áreas do estuário, como também definir fluxos de propriedades entre caixas, o que, dependendo da análise, pode revelar-se uma ferramenta importante na compreensão da dinâmica do sistema. No Anexo II (Definição das Caixas de Integração) encontra-se descrito de forma mais pormenorizada o procedimento utilizado na definição das Caixas de Integração, evidenciando os critérios utilizados para a obtenção da Figura 4.



Figura 4 – Caixas de integração consideradas para a Ria de Aveiro.

2. Condições Iniciais

A indicação das condições iniciais para o cálculo do modelo é feita tendo por base as Caixas de Integração anteriormente definidas. Considera-se que cada propriedade tem, em cada caixa, uma concentração uniforme no instante inicial. Neste estudo, os valores utilizados para a inicialização do modelo são, por sua vez, resultados de simulações teste realizadas anteriormente, tendo sido, então, utilizado como método de inicialização, um valor constante, resultante de uma média de todos os registos efectuados na Ria de Aveiro. A Tabela 1 apresenta as concentrações iniciais para cada propriedade, em cada uma das zonas consideradas.

Caixa de Integração	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Salinidade (psu)	27	31	17	0,9	27	28	18	27	34	35
Oxigénio Dissolvido (mg O ₂ / L)	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
Matéria em Suspensão (mg / L)	8,9	5,6	13,8	12,3	7,1	7,13	13,3	6,8	3,7	1,2
Fitoplâncton (mg C / L)	3,4	2,0	2,42	0,25	1,46	1,56	1,48	2,0	0,89	0,25
Zooplâncton (mg C / L)	0,1	0,08	0,04	0,002	0,05	0,06	0,03	0,06	0,05	0,03
Nitrato (mg N / L)	2,7	1,0	1,7	0,7	0,8	0,8	2,3	0,7	0,4	0,2
Nitrito (mg N / L)	0,3	0,1	0,15	0,02	0,07	0,07	0,2	0,07	0,05	0,03
Amónia (mg N / L)	0,26	0,05	0,17	0,16	0,09	0,09	0,44	0,05	0,05	0,05
$PON^1 (mg N / L)$	0,03	0,03	0,03	0,24	0,05	0,03	0,08	0,03	0,02	0,009
DONnr ² (mg N / L)	0,15	0,12	0,23	0,23	0,15	0,16	0,45	0,15	0,08	0,02
DONr ³ (mg N / L)	0,06	0,06	0,1	0,1	0,07	0,08	0,22	0,07	0,04	0,01

Tabela 1 – Condições iniciais para a simulação da qualidade da água na Ria de Aveiro.

¹ PON - Azoto Orgânico Particulado

³ DONr – Azoto Orgânico Refractário

² DONnr – Azoto Orgânico Dissolvido Não Refractário

3. Condições Fronteira

Considera-se que, no mar, a variação sazonal das propriedades em estudo não é significativa, pelo que se assume um valor constante, apresentado na Tabela 2.

Temperatura (°C)	18
Salinidade (psu)	36
Oxigénio Dissolvido (mg O ₂ / L)	8
Matéria em Suspensão (mg / L)	0.1
Fitoplâncton (mg C / L)	0,03
Zooplâncton (mg C / L)	0,003
Nitrato (mg N / L)	0,02
Nitrito (mg N / L)	0,01
Amónia (mg N / L)	0,002
PON (mg N / L)	0.0009
DONnr (mg N / L)	0.002
DONre (mg N / L)	0.001

Tabela 2 – Características da fronteira marítima.

A modelação da qualidade da água numa zona de transição como é a Ria de Aveiro, tendo como base as condições hidrodinâmicas do sistema, requer a consideração de existência de maré. Neste estudo, uma vez que a simulação em simultâneo, das condições hidrodinâmicas e de qualidade da água, implicaria um tempo de cálculo impraticável, opta-se por utilizar um ficheiro hidrodinâmico. O ficheiro hidrodinâmico é o resultado da gravação das condições hidrodinâmicas simuladas durante um ciclo semidiurno da maré (12h 25m e 30s), podendo ser utilizado e repetido durante a simulação da qualidade da água, diminuindo em grande medida o tempo total de cálculo do modelo. Esta abordagem tem o inconveniente de eliminar a variabilidade associada ao ciclo de maré viva-maré morta. No entanto, os ganhos em rapidez de cálculo compensam as simplificações consideradas.

Sendo as fronteiras, à excepção do mar, consideradas como fechadas, implica que todas as trocas existentes entre a terra e o mar são assumidas como uma descarga. As entradas

de água doce na ria de Aveiro, incluindo a afluência dos rios, funcionam, assim, como descargas em determinadas células da malha. Localizando-se as descargas em pontos próximos de terra, é possível que durante a maré vazia, algumas das células consideradas fiquem a descoberto. Nestes casos, a descarga é feita na célula de cálculo coberta mais próxima, sendo portanto variável ao longo do tempo. A quantificação destas descargas será objecto de análise específica no ponto seguinte deste trabalho.

4. Descargas na Ria de Aveiro

4.1. Localização das Descargas

A Ria de Aveiro é constituída por cinco canais principais, na cabeceira de cada um dos quais se considera a existência de uma descarga principal de água doce, Figura 5. Assim, ao Canal Principal ou Espinheiro está associada a descarga do Rio Vouga, ao Canal de S. Jacinto/Ovar o Rio Caster, ao Canal da Murtosa o Rio Antuã, ao Canal de Ílhavo o Rio Boco e por último, no Canal de Mira considera-se a existência de um conjunto de valas de drenagem que desaguam na zona da Barrinha de Mira e funcionam como uma entrada de água doce no interior da Ria de Aveiro.



Figura 5 – Descargas na Ria de Aveiro.

4.2. Caracterização das Descargas

A caracterização de cada uma das descargas é feita em termos de caudal afluente à Ria de Aveiro e de concentração de algumas propriedades da água, relevantes para o estudo em causa: *fitoplâncton*, nitrato (NO_3^{-}), nitrito ($NO_2^{2^{-}}$), matéria em suspensão, amónia (NH_4^+) e as três formas de azoto orgânico: azoto orgânico dissolvido refractário (DONre), azoto orgânico dissolvido não refractário (DONnr) e azoto orgânico particulado (PON).

Ao contrário do mar, onde as variabilidades sazonais das propriedades e dos níveis de água são relativamente bem conhecidas, nos rios, essa variabilidade depende de inúmeros factores, o que torna, em certa medida, difícil identificar uma variação sazonal característica. De uma maneira geral, a variabilidade das descargas é significativa, não só ao longo de um ano, mas também ao longo de anos diferentes, dependendo das condições climatéricas que se fazem sentir e ainda do tipo de ocupação do solo na área de drenagem associada. Assim, a caracterização das descargas tem a dificuldade acrescida de se pretender, neste estudo, simular uma situação típica de descargas existentes na Ria de Aveiro.

Para todos os rios considerados, a caracterização é feita com base nos registos de campanhas de amostragem realizadas no âmbito do projecto ModelRia e pelo Instituto Hidrográfico e ainda estações da rede de amostragem do INAG, tentando de alguma forma encontrar particularidades em cada uma das descargas. Sempre que possível, considera-se, neste estudo, o maior número de dados disponíveis.

Em termos de caudal, a rede de amostragem do Instituto da Água (INAG) possui algumas estações próximas dos rios em causa, com um número bastante significativo de registos, pelo que a identificação de uma variação sazonal é feita com base nestes registos. No entanto, como foi referido anteriormente, a simulação da qualidade da água na Ria de Aveiro requer a utilização de um ficheiro hidrodinâmico que permita um tempo de cálculo mais reduzido, o que tem, por sua vez, a desvantagem de não permitir explicitamente uma simulação da variação sazonal de caudal, uma vez que o caudal das descargas permanece invariável ao ser utilizado um ficheiro hidrodinâmico. No sentido de tentar minimizar esta desvantagem optou-se por simular um ano considerado como mediano, utilizando quatro ficheiros hidrodinâmicos com descargas de água doce diferentes, dispostos ao longo do ano de forma a permitir uma aproximação satisfatória à variação encontrada com base no valor mediano dos registos.

No que diz respeito às concentrações das propriedades da água em análise, opta-se por considerar um valor constante ao longo do ano, uma vez que os dados disponíveis não permitem, ao contrário do caudal, estabelecer um padrão de variação característico ao longo de um ano.

No Anexo III (Quantificação das Descargas na Ria de Aveiro) encontra-se descrita, com algum detalhe, toda análise desenvolvida para cada descarga, apresentando-se neste ponto do relatório apenas as conclusões finais do tratamento de dados efectuado.

4.2.1. Rio Vouga

A Figura 6 apresenta os valores de descarga do Rio Vouga utilizados para a gravação dos ficheiros hidrodinâmicos, necessários à simulação do ano mediano (representados na forma de barras), e a linha que representa a variação real do caudal ao longo do ano mediano, construída com base nos valores medianos calculados em cada mês do ano.



Figura 6 – Variação sazonal da descarga do Rio Vouga.

A variação sazonal do caudal é caracterizada por um período de caudais elevados durante os meses de Inverno e períodos de seca durante o Verão, concordante com o clima mediterrâneo que caracteriza o país. Relativamente às concentrações das diversas propriedades de qualidade da água em estudo, a Tabela 3 apresenta os valores considerados, resultantes do tratamento de dados efectuado.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,15
Amónia (mg N / L)	0,09
Nitrato (mg N / L)	0,68
Nitrito (mg N / L)	0,02
Matéria em Suspensão (mg / L)	12,50
DONnr (mg N / L)	0,23
DONr (mg N / L)	0,1
PON (mg N / L)	0,34

Tabela 3 – Quantificação da descarga do Rio Vouga.

4.2.2. Rio Antuã

À semelhança do Rio Vouga a descarga do Rio Antuã apresenta também uma variação sazonal típica, com valores mais elevados de caudal durante os meses de Inverno, embora apresente uma contribuição menor em termos de caudal. A Figura 7 permite comparar a variação sazonal real, conseguida à custa dos valores medianos de cada um dos meses do ano, e a variação imposta na simulação do modelo.



Figura 7 - Variação sazonal da descarga do Rio Antuã.

Relativamente às concentrações das propriedades da água, a Tabela 4 apresenta os valores considerados na simulação.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,12
Amónia (mg N / L)	0,14
Nitrato (mg N / L)	2,30
Nitrito (mg N / L)	0,19
Matéria em Suspensão (mg / L)	20,7
DONnr (mg N / L)	0,25
DONr (mg N / L)	0,11
PON (mg N / L)	0,36

Tabela 4 - Quantificação da descarga do Rio Antuã.

4.2.3. Rio Caster

A variação sazonal do caudal correspondente ao Rio Caster é conseguida à custa dos valores encontrados para o Rio Antuã, uma vez que não existem registos disponíveis para a caracterização da descarga do Rio Caster. Admitindo que as bacias hidrográficas são semelhantes em termos de topografia e ocupação do solo, pode estabelecer-se uma proporção entre os caudais dos rios Antuã e Caster e as respectivas áreas de drenagem associados. Desta forma, a evolução do caudal ao longo do ano segue o mesmo andamento que o Rio Antuã, diferindo apenas na sua ordem de grandeza. A Figura 8 representa a evolução do caudal mediano ao longo de um ano, bem como a aproximação feita para simulação no modelo, utilizando os ficheiros hidrodinâmicos.



Figura 8 - Variação sazonal da descarga do Rio Caster.

Para a caracterização em termos de concentração das propriedades consideram-se os valores registados nas campanhas *ModelRia* durante o ano de 2000. Note-se que não foram efectuadas medições de todas as propriedades necessárias à simulação, nomeadamente as diferentes formas de azoto orgânico, pelo que, nesses casos, opta-se por utilizar alguns valores de referência indicados na literatura. A Tabela 5 apresenta os valores de concentração considerados no estudo.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,15
Amónia (mg N / L)	1,32
Nitrato (mg N / L)	5,84
Nitrito (mg N / L)	0,58
Matéria em Suspensão (mg / L)	16,60
DONnr (mg N / L)	0,13
DONr (mg N / L)	0,05
PON (mg N / L)	0,18

Tabela 5 - Quantificação da descarga do Rio Caster.

4.2.4. Rio Boco

A caracterização da descarga do Rio Boco é feita também à custa dos valores encontrados para outra bacia hidrográfica, neste caso são utilizados os valores referentes ao Rio Vouga, por se considerar que dada a proximidade das bacias, estas seriam, de certa forma, mais semelhantes. A figura seguinte, Figura 9, representa a variação sazonal da descarga do Rio Boco comparada com a variação extrapolada a partir dos registos para o Rio Vouga.



Figura 9 - Variação sazonal da descarga do Rio Boco.

A Tabela 6 apresenta os valores de concentração considerados, conseguidos recorrendo aos registos das campanhas realizadas no âmbito deste projecto.

Propriedades	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,15
Amónia (mg N / L)	0,04
Nitrato (mg N / L)	3,31
Nitrito (mg N / L)	0,33
Matéria em Suspensão (mg / L)	22,20
DONnr (mg N / L)	0,72
DONr (mg N / L)	0,31
PON (mg N / L)	1,03

Tabela 6 - Quantificação da descarga do Rio Boco.

4.2.5. Valas de Drenagem

Existe um conjunto de valas de drenagem que desaguam no canal de Mira cerca de 3 m^3/s de água doce. Porque se trata de uma construção artificial, considera-se que este afluente da Ria de Aveiro, não se comporta, em termos sazonais, como uma bacia hidrográfica e, não conhecendo dados sobre a sua variação ao longo do ano, opta-se por considerar o valor de 3 m^3/s constante durante todo o ano da simulação. As características em termos das concentrações das propriedades em estudo apresentam-se na Tabela 7 e são referentes aos dados existentes das campanhas do *ModelRia*.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,46
Amónia (mg N / L)	0,23
Nitrato (mg N / L)	1,83
Nitrito (mg N / L)	0,18
Matéria em Suspensão (mg / L)	16,10
DONnr (mg N / L)	0,39
DONr (mg N / L)	0,17
PON (mg N / L)	0,56

Tabela 7 - Quantificação da descarga das valas de drenagem no Canal de Mira.

4.2.6. Quantificação Relativa das Descargas

Para uma melhor percepção das características de cada descarga face às restantes, apresentam-se de seguida um conjunto de figuras que representam a contribuição relativa em termos de fluxo de massa das propriedades. Como foi referido anteriormente, a simulação de um ano considerado como mediano é feita em quatro fases, utilizando três ficheiros hidrodinâmicos diferentes. A contribuição mássica de cada descarga depende do seu caudal, pelo que em cada uma das fases simuladas a contribuição será distinta, à excepção das fases II e IV às quais correspondem ficheiros hidrodinâmicos idênticos. A Figura 10 representa a contribuição das descargas durante o primeiro trimestre do ano.



Figura 10 – Contribuição relativa das descargas na primeira fase do ano mediano.

Verifica-se que é do Rio Vouga que surge a maior contribuição, quer em termos de caudal, com cerca de 70%, quer em termos de azoto orgânico total e de matéria em suspensão. Note-se que relativamente aos principais nutrientes considerados, amónia e nitrato, o Rio Caster, apesar de não ter um caudal muito elevado, a sua concentração é suficientemente elevada para que este seja o rio que mais contribui para a quantidade de nutrientes existente na Ria, nomeadamente amónia.

A figura seguinte, Figura 11, representa as contribuições na segunda (Meses de Abril e Maio) e quarta fases (Dezembro) da simulação, onde as proporções entre as descargas se mantêm praticamente iguais à fase anterior. Em valor absoluto estas contribuições serão menores, uma vez que em todas as descargas o caudal é mais reduzido face à primeira fase de simulação.



Figura 11 - Contribuição relativa das descargas na segunda e quarta fases do ano mediano.

Por último, a Figura 12, diz respeito à terceira fase de simulação, correspondendo aos meses de menor caudal. As proporções entre fluxos de massa descarregados são agora um pouco alterados já que, nesta fase, o caudal da descarga das Valas de Drenagem no Canal de Mira mantém-se, ao contrário das restantes que diminuem significativamente. Desta forma, nesta terceira fase as Valas de Drenagem tornam-se uma fonte importante de nutrientes e matéria em suspensão na Ria de Aveiro.



Figura 12 - Contribuição relativa das descargas na terceira fase do ano mediano.

III. Hidrodinâmica do Sistema

Os processos hidrodinâmicos são um importante condicionante ao desenvolvimento dos processos ecológicos e, neste sentido, apesar de ter sido já objecto de estudo de relatórios anteriores, opta-se por apresentar alguns dos seus principais aspectos. A simulação hidrodinâmica do sistema é feita utilizando uma malha fina, com 326 × 318 células, considerando a existência de maré na fronteira aberta (componentes M2 e S2) e um valor constante de descarga para cada uma das fontes de água doce existentes na Ria, apresentados na Tabela 8. Estes valores são o resultado da média dos caudais atingidos ao longo do ano mediano (apresentado anteriormente) para cada uma das descargas.

Rio Vouga	28.8 m ³ /s
Rio Antuã	$6.3 \text{ m}^3/\text{s}$
Rio Caster	$5 \text{ m}^3/\text{s}$
Rio Boco	$2.5 \text{ m}^{3}/\text{s}$
Valas de Drenagem Artificiais no Canal de Mira	$3 m^3/s$

Tabela 8 – Descargas de água doce na simulação dos processos hidrodinâmicos.

1. Circulação Transiente

As figuras seguintes representam os campos de velocidade obtidos pelo modelo para algumas situações particulares de maré viva e maré morta. A situação de enchente, durante a maré viva é apresentada na Figura 13, da qual a Figura 14 corresponde a uma ampliação, focando a zona central da Ria de Aveiro. A Figura 13 mostra que é na zona central da Ria de Aveiro que são encontradas maiores intensidades de velocidade, razão pela qual se opta por apresentar para as restantes situações apenas uma imagem ampliada dessa mesma zona. Além da representação da velocidade através de um vector, que permite distinguir o seu sentido, o módulo da velocidade é ainda representado pela escala de cores à esquerda, permitindo uma mais fácil comparação entre figuras.

Comparando a Figura 14 com Figura 15 é possível distinguir maiores intensidades da

velocidade durante a situação de vazante, atingindo cerca de 2.5 m/s na zona da embocadura. Este é um resultado previsível, uma vez que resulta do facto de existirem descargas de água doce no interior da Ria.

A situação de maré morta é representada pelas Figura 16 e Figura 17, mais uma vez para a enchente e vazante, respectivamente. Da sua análise é possível verificar que na vazante, durante a maré morta, o valor máximo de velocidade atingido é de apenas 1 m/s na zona da embocadura, confirmando que as velocidades durante um período de maré viva são, de facto, mais intensas, relativamente a uma situação de maré morta.



Figura 13 – Campo de velocidade em situação de enchente durante a Maré Viva.



Figura 14 - Campo de velocidade em situação de enchente durante a Maré Viva (interior).



Figura 15- Campo de velocidade em situação de vazante durante a Maré Viva (interior).



Figura 16 – Campo de velocidade em situação de enchente durante a Maré Morta (interior).



Figura 17 – Campo de velocidade em situação de vazante durante a Maré Morta (interior).
2. Circulação Residual

As figuras seguintes representam a circulação residual na Ria de Aveiro obtida após 38 dias de simulação. A circulação residual é calculada pelo sistema MOHID como uma integração das propriedades instantâneas durante o período de simulação e representa, no fundo, a média das intensidades e sentidos calculados em cada célula da malha. Na Figura 18, que representa o fluxo residual em toda a zona da Ria de Aveiro, encontram-se assinaladas as zonas às quais dizem respeito as ampliações representadas nas restantes figuras.

É possível visualizar a existência de vários vórtices no interior da Ria de Aveiro o que possivelmente indica uma intensa mistura da água no seu interior. Nas Figura 19 e Figura 20 é possível distinguir o Canal Principal (ou Espinheiro) e o Canal de S.Jacinto/Ovar como canais predominantemente de vazante, enquanto que a enchente é feita percorrendo a entrada do Canal de Ilhavo. Junto à zona de embocadura a intensidade do fluxo residual é mais reduzida, mas na Figura 21, que representa uma ampliação do local, é possível verificar a existência dois vórtices junto ao jacto de vazante, além de vários vórtices de pequena dimensão, ainda no interior da Ria. Estes pequenos vórtices, provocados pelas altas velocidades atingidas, ao longo dos canais principais, são responsáveis pela existência de uma recirculação bastante intensa no interior da Ria que, associado ao facto de a maré encher e vazar de forma diferente ao longo dos vários canais, provoca um efeito de mistura considerável no interior da Ria.





Figura 19 – Fluxo residual na Ria de Aveiro (Zona Central).





Figura 21 – Fluxo residual na Ria de Aveiro (Zona da Embocadura).

3. Tempo de Residência

O tempo de residência da água no interior do estuário é um importante indicador para a compreensão global do sistema ecológico. De acordo com a descrição em 'Technical Guidance Manual for Nutrient Criteria' (EPA, 2001), existem diversas formas de definir tempo de residência, mas, em geral, pretende-se determinar quanto tempo a água permanece no interior do estuário, ou o seu tempo de renovação. Nestes sistemas, grande parte dos nutrientes têm origem externas, ou seja, através dos rios ou descargas afluentes e o tempo de residência do estuário torna-se um factor importante no que diz respeito à disponibilidade de nutrientes no seu interior.

Quando o tempo de residência do estuário é muito baixo, embora a disponibilidade de nutrientes possa não ser reduzida, o facto de estes passarem um período de tempo reduzido no seu interior, pode ser um importante factor limitativo da produção primária. Nestas condições, apesar de não existir realmente uma falta de nutrientes, estes não são consumidos, simplesmente porque não passam tempo suficiente no interior do estuário para permitir que sejam desencadeados os processos de produção primária. Assim, considera-se que um estuário, com um tempo de residência baixo, apresentará, à partida, importantes exportações de nutrientes e *blooms* de algas menos frequentes.

Neste estudo, o tempo de residência da Ria de Aveiro é determinado recorrendo ao Módulo Lagrangeano do sistema MOHID, que permite utilizar o conceito de traçador lagrangeano com a finalidade de "marcar" a água no interior da Ria. Considera-se a existência de maré (componentes M2 e S2) e para as descargas de água doce são considerados os respectivos valores de caudal médio anual, já apresentados na Tabela 8. A simulação parte de uma distribuição de partículas que preenche todo o volume do estuário, considerando a jusante o limite definido em "Limites de Jusante dos Estuários Portugueses" (INAG, 2001).

O volume total do estuário varia ao longo do tempo devido, não só às oscilações diárias de maré, mas também à existência do ciclo maré viva/maré morta. A Figura 22 representa a variação de volume de água no interior do estuário ao longo do período de simulação. A diferença de volume entre a maré-cheia e vazia – prisma de maré – varia entre 0.7×10^8 m³ na maré morta e 1.4×10^8 m³ na maré viva, sendo o volume médio do estuário cerca de 1.8×10^8 m³. A contribuição média diária das descargas de água doce no interior da Ria totaliza cerca de 3.9×10^6 m³, o que significa que, na Ria de Aveiro, as trocas de água com o mar assumem uma importância maior relativamente às trocas com a terra.



Figura 22 - Variação do volume de água no interior da Ria de Aveiro durante o período de simulação.

O volume partículas em cada caixa corresponde, no instante inicial, ao volume de água da respectiva caixa, pelo que, no total, o volume de partículas representa o volume total do estuário. Na Figura 23 apresenta-se a distribuição inicial de partículas no interior do estuário. Cada uma das Caixas de Integração (definidas no Anexo II) possui uma coloração distinta, o que permite distinguir a origem das partículas ao longo da simulação. Cada partícula tem associada a sua posição, ou seja, a caixa em que se encontra em cada instante, mas também a sua caixa de origem. Com este tipo de informação é possível determinar, em cada instante, o volume de partículas que se encontram no interior do estuário e as proporções relativas das contribuições das várias origens.



A Figura 24 e Figura 25 representam a distribuição de partículas após 10 e 20 dias de simulação, respectivamente. Verifica-se que o número de partículas no interior do estuário diminui gradualmente ao longo da simulação. Após 10 dias, cerca de 60% das partículas permanece ainda no interior da Ria de Aveiro, mas decorridos 20 dias este valor é reduzido para 20%. A zona próxima da embocadura e, em geral, a zona central da Ria é caracterizada por uma mistura completa das partículas das várias regiões, sugerindo que o tempo de residência nas caixas localizadas no centro da Ria será maior do que nas caixas próximas das zonas de descarga dos rios. Atendendo à descrição da circulação transiente e residual (discutidas anteriormente), o efeito dos vórtices de pequenas dimensões no interior da ria proporcionam, em geral um tempo de residência longo das partículas no seu interior e uma mistura rápida das partículas provenientes das várias origens.





Figura 25 - Distribuição das partículas após 20 dias de simulação.

As figuras permitem ainda distinguir algumas partículas de cor amarela (Caixa 1) que, após 10 e 20 dias ainda permanecem na sua caixa de origem, o que significa que se trata de uma zona onde o tempo de residência da água é bastante elevado, relativamente a outras. Também na zona de descarga do Rio Vouga, à qual correspondem as partículas de cor vermelha, o tempo de residência parece ser superior a 20 dias. Na zona exterior do estuário as partículas encontram-se, após 10 e 20 dias, totalmente misturadas e é possível distinguir uma tendência de transporte para norte verificando-se, assim, o efeito da força de Coriolis.

A Figura 26 representa a fracção de partículas no interior do estuário ao longo do período de simulação, ou seja, a razão entre o número de traçadores lagrangeanos existentes no interior da Ria de Aveiro e o volume total do estuário.



Figura 26 - Evolução da fracção de partículas lagrangeanas no interior do estuário.

A relação entre a quantidade de partículas no interior do estuário e a quantidade inicial diminui ao longo do tempo, devido à renovação da água imposta pelas constantes descargas de água doce que afluem à Ria de Aveiro. Considerando o tempo de residência como o tempo requerido para que 80% da água, que inicialmente se encontrava no seu interior, tenha sido renovada pode, observando a figura anterior, considerar-se que na Ria de Aveiro o tempo de residência médio é de cerca de 20 dias. Apenas como termo de comparação pode referir-se que seguindo a mesma metodologia para o Estuário do Tejo, este apresenta também um valor de, aproximadamente, 20 dias, enquanto que o Estuário do Mondego

apresenta um tempo de residência, na ordem dos 4 dias, inferior ao valor encontrado para a Ria de Aveiro. Os 20 dias de tempo de residência é um valor global da Ria de Aveiro, mas é possível, seguindo esta mesma metodologia, determinar o tempo de residência de cada uma das áreas definidas anteriormente como as Caixas de Integração. No entanto, talvez mais importante do que conhecer o tempo de residência de cada zona do estuário, é poder identificar as origens da água que se encontra em determinada zona. Nomeadamente, conhecer de que forma a água vinda do exterior do estuário, rios ou mar, contribui para o volume presente em cada zona. Esta monitorização pode ser quantificada calculando para cada origem (ex: rios, oceano, zonas do estuário) a sua contribuição relativa para o volume total presente na área de estudo, em função do tempo. A média desta contribuição relativa no tempo permite, de uma forma objectiva, quantificar a influência, acumulada no tempo, das diversas origens de água sobre áreas específicas da Ria de Aveiro, em termos de volume. Esta média pode representar-se da seguinte forma:

$$\overline{Con}_{i,j}(T) = \frac{\int_{0}^{T} \frac{V_{i,j}(t)}{V_{i}(t)} dt}{T}$$

sendo V_i(t) o volume total de água que existe na zona i no instante t e V_{i,j}(t) o volume de água presente na zona i no instante t da origem j (rio, oceano ou outra zona da Ria), T o tempo de simulação e $\overline{Con}_{i,j}(T)$ a contribuição média ao longo de T da origem j para a área monitorizada i. Esta metodologia foi aplicada à Ria de Aveiro admitindo que as áreas de monitorização correspondem às origens de água, sendo os rios e a zona exterior à Ria considerados como uma única origem.

A função $\overline{Con}_{i,j}(T)$ foi calculada, para cada origem, após 5, 10 e 20 dias de simulação, cujos

resultados são apresentados respectivamente pela Figura 27, Figura 28 e Figura 29. Em cada caixa é representada, num gráfico circular, a contribuição média das várias origens da água que passou pela caixa durante o tempo de simulação. No gráfico a "fatia" branca representa a contribuição externa, ou seja, a água que se encontrava no início da simulação na zona exterior à Ria (rios e oceano).

A Figura 27 mostra que após 5 dias de simulação, a maior parte da água permanece na sua caixa de origem, excepto para as caixas 4, 8, 9 e 10. Estas são as zonas do estuário que têm tempos de residência da água menores, embora por diferentes razões. Na Caixa 4, cerca de 70% do volume inicial da água foi renovado após 5 dias de simulação devido, principalmente à contribuição da descarga do Rio Vouga nessa caixa (fracção representada a branco), tendo as restantes origens uma contribuição pouco significativa. A Caixa 9, localizada na zona próxima da embocadura, possui contribuição de praticamente todas as origens e a Caixa 10, junto ao mar é, devido aos efeitos da maré, muito influenciada pelas trocas com o oceano. Para a Caixa 8 a distinção entre as fontes de "água fresca" (fracção branca no gráfico) não é tão clara como em outras zonas da Ria, uma vez que existem, não só uma contribuição directa da água doce descarregada pelas Valas de Drenagens consideradas neste canal, mas também trocas com a água do mar, através da Caixa 9.



Figura 27 - Troca de água entre caixas após 5 dias de simulação.

Através da figura é ainda possível verificar que de facto as Caixas 1, 3 e também a Caixa 7, possuem ainda, após 5 dias de simulação, mais de 50% do volume de água inicial, o que indica que estas serão as zonas com um tempo de residência mais elevado dentro da Ria de Aveiro, ou seja, à partida estas serão zonas propícias para a produção primária de biomassa. Por sua vez, as caixas localizadas na zona central da Ria, Caixas 2, 5, 6 e 9, com uma elevada contribuição de praticamente todas as outras origens de água, são consideradas zonas de intensa mistura, já sugerida anteriormente na análise das velocidades instantâneas e circulação residual.

Após 10 dias de simulação (Figura 28) a contribuição relativa de cada uma das origens de água é, em todas as caixas, superior a 75% e apenas na Caixa 1 é possível identificar uma significativa contribuição do volume de água com origem nessa mesma caixa. Este é um resultado concordante com a afirmação feira anteriormente, classificando a Caixa 1 como a zona da Ria de Aveiro com maior tempo de residência. Após 20 dias (Figura 29), sendo este o tempo de residência considerado para a Ria de Aveiro, verifica-se que, de facto, em geral, cerca de 80% do volume inicial de água foi renovado, sendo em algumas caixas este valor superior a 95%.



Figura 28 - Troca de água entre caixas após 10 dias de simulação.



Figura 29 - Troca de água entre caixas após 20 dias de simulação.

IV. Modelação Ecológica

A modelação ecológica do sistema da Ria de Aveiro será tanto mais eficaz, no sentido de melhor se aproximar à realidade, quanto maior for o número de processos que o modelo permite descrever. Ao longo deste estudo, o sistema MOHID sofreu algumas alterações, no sentido de proporcionar a simulação dos processos relacionados com as macroalgas, que se julgam ser um importante produtor primário no sistema ecológico da Ria de Aveiro.

A importância das macroalgas na Ria pode ser testada através da comparação dos resultados do modelo em duas situações: SEM macroalgas, considerando apenas fitoplâncton como produtor primário de biomassa e COM macroalgas, onde se considera a presença, não só de fitoplâncton, mas também de macroalgas. As condições fronteira e iniciais do modelo são necessariamente as mesmas, para que seja possível estabelecer uma comparação entre os resultados das duas simulações, garantindo-se que as diferenças encontradas são efectivamente uma consequência da existência de macroalgas no sistema. São apresentados e discutidos neste capítulo os resultados obtidos pelo modelo nas duas simulações.

1. Distribuição Espacial das Propriedades

As figuras seguintes representam a distribuição média de concentração das várias propriedades, obtidas como resultado do modelo nas duas simulações, para o mês de Maio. Verifica-se que existem algumas diferenças significativas entre as simulações COM e SEM macroalgas, não só em termos de concentrações médias atingidas, mas também ao nível da própria distribuição das propriedades na Ria de Aveiro.



Figura 30 - Distribuição espacial média de fitoplâncton no mês de Maio (COM e SEM macroalgas).



Figura 31 - Distribuição espacial média de amónia no mês de Maio (COM e SEM macroalgas).

Nitrato



Figura 32 - Distribuição espacial média de nitrato no mês de Maio (COM e SEM macroalgas).

As concentrações de fitoplâncton, na presenca de macroalgas, são reduzidas de uma forma muito significativa (observável analisando as escalas das figuras, Figura 30). Sem macroalgas é possível encontrar um máximo de cerca de 8 mg C/L de fitoplâncton, nas zonas da descarga dos rios Vouga e Caster, enquanto que, na presença de macroalgas o valor máximo diminui para 0.3 mg C/L e a zona de produção máxima passa a ser o Canal de Mira. Ao nível das concentrações de nitrato e amónia, a presença de macroalgas no sistema provoca alterações, uma vez que se tratam de organismos fotossintéticos que utilizam estes nutrientes para a produção de energia química, à semelhança do fitoplâncton. As concentrações de nitrato no sistema diminuem de forma muito significativa, como consequência directa do aumento de consumo deste nutriente (Figura 32). Quanto à amónia, a Figura 31 evidencia que, em média, no mês de Maio, a concentração deste nutriente tornase, em determinadas zonas, superior na presenca de macroalgas. Apesar de esta se tratar de uma forma de azoto energeticamente mais vantajosa para os seres fotossintéticos, tanto o fitoplâncton como as macroalgas funcionam igualmente como fontes de amónia no sistema, quando esta é libertada para o meio através das suas excreções. A amónia é ainda um produto resultante do processo de mineralização, levado a cabo por bactérias, que decompõem a matéria orgânica, particulada ou dissolvida, como forma de obtenção de energia. Desta forma, este aumento de amónia (no mês de Maio), na presença de macroalgas e nas zonas próximas das descargas dos rios, poderá indicar que estas são zonas de elevada produção de macroalgas e também zonas onde existe uma importante deposição da matéria particulada resultante das macroalgas, posteriormente convertida em amónia.

A concentração de sedimentos na água (Figura 33) não é alterada pelo facto de existirem macroalgas no sistema, pois é apenas condicionada por processos físicos. Em termos da sua distribuição espacial é possível referir que os valores máximos encontram-se nas zonas próximas das descargas dos rios, uma vez que no interior do estuário os sedimentos têm tendência para a deposição, acabando por, junto da embocadura apresentar uma concentração bastante inferior à zona das descargas.



Figura 33- Distribuição espacial média de Sedimentos no mês de Maio (COM e SEM macroalgas).

Figura 34 representa a distribuição espacial da concentração de macroalgas (expressa em Kg/m²) obtida pelo modelo após 4 anos de simulação. Através da figura é verificada a hipótese colocada anteriormente de que as zonas próximas das descargas dos rios são áreas de estabilização de macroalgas, coincidindo com as zonas onde existe maior quantidade de nutrientes vindos das descarga e velocidades de escoamento suficientemente baixas para permitir que as macroalgas não sejam quebradas e "arrastadas" pela água para outras zonas da Ria.



Figura 34 – Distribuição espacial das macroalgas após 4 anos de simulação.

2. Análise das Séries Temporais

A figura seguinte representa a evolução anual de *fitoplâncton*, *zooplâncton*, amónia, nitrato, azoto orgânico dissolvido (DON) e azoto orgânico particulado (PON) na Ria de Aveiro, nas duas simulações. Os vários gráficos representam a evolução média na Ria, isto é, o resultado da integração espacial dos valores instantâneos obtidos em cada uma das células que compõem a malha utilizada.



Figura 35 – Evolução média anual das propriedades na Ria de Aveiro (COM e SEM Macroalgas).

As figuras permitem, numa primeira análise, verificar que existe, de facto, uma influência significativa das macroalgas na dinâmica do sistema da Ria de Aveiro. Em termos de fitoplâncton, a diferença de valores obtidos nas duas simulações é bastante significativa. Na simulação SEM macroalgas a evolução anual da concentração de fitoplâncton apresenta vários blooms (com um valor máximo de cerca de 3 mg C/L no mês de Abril) condicionados, não só pelo estabelecimento de boas condições de crescimento mas também, pela interacção predador-presa com o zooplâncton. Na simulação COM macroalgas o valor máximo de fitoplâncton obtido é de 0.2 mg C/L, o que significa que foi provocada uma redução de concentração de fitoplâncton em cerca de uma ordem de grandeza. A Figura 36 permite visualizar no mesmo gráfico as evoluções de fitoplâncton e zooplâncton nas duas simulações, facilitando a percepção das diferenças encontradas em termos da dinâmica das relações presa-predador nos dois cenários. Enquanto que na simulação SEM macroalgas a existência de vários blooms é consequência directa de uma relação predador-presa bastante intensa, quando existem macroalgas no sistema, essa relação deixa de ser o factor mais importante na evolução do fitoplâncton, sendo o desenvolvimento deste, provavelmente condicionado pela falta de nutrientes.

A concentração de nitrato é fortemente diminuída pela presença de macroalgas no sistema, verificando-se também uma diminuição na sua variabilidade sazonal face à simulação SEM macroalgas (devido principalmente às excreções dos organismos). Quanto à amónia a diminuição esperada não é tão significativa sendo mesmo, em algumas alturas do ano, superior ao valor obtido na simulação SEM macroalgas. A variabilidade sazonal da amónia é, nas duas simulações, algo diferente, embora se mantenha uma tendência para a existência de valores mais elevados durante o Inverno e valores mais baixos durante o Verão (quando existirá maior consumo deste nutriente). É ainda interessante verificar que a simulação COM macroalgas apresenta uma variabilidade diária mais importante (avaliando a largura da banda de concentrações). Esta maior variabilidade é certamente consequência da existência de um número muito maior de organismos, o que aumentará a extensão de todos os processos com eles relacionados, não só em termos de amónia mas, de uma maneira geral, com todas as propriedades presentes no sistema. Também nas concentrações de DON e PON se verifica um aumento na simulação com macroalgas, evidenciando o papel

importante das excreções dos organismos no sistema.



Figura 36 – Evolução média anual de Fitoplâncton e Zooplâncton na Ria de Aveiro (COM e SEM Macroalgas).

Quanto à concentração de macroalgas [kg/m2], a Figura 37 representa a sua evolução, ao longo dos três últimos anos de uma simulação de 4 anos. Verifica-se que existe, ao longo dos três anos, um aumento de biomassa de macroalgas no interior da Ria de Aveiro (a área mantém-se constante), sugerindo, no entanto, uma tendência para a estabilização. O tempo de estabilização da biomassa de macroalgas parece ser demasiado longo (4-5 anos), comparado com o tempo necessário para o fítoplâncton (cerca de 1 ano), o que é, em parte, devido a uma concentração inicial, imposta no início da simulação, demasiado baixa. O "lento" crescimento das macroalgas pode dever-se fundamentalmente à quantidade de nutrientes disponível na Ria de Aveiro, que parece ser insuficiente para permitir a rápida estabilização das biomassa de macroalgas no interior da Ria. No caso do fitoplâncton, porque a biomassa total presente no interior da ria é substancialmente menor (cerca de 300 ton C face a 15 000 ton C de macroalgas), a quantidade de nutrientes necessária para atingir a estabilização não é tão elevada e consequentemente o tempo de estabilização será inferior.



Figura 37 – Evolução da concentração de macroalgas (kg/m2) ao longo de três anos consecutivos.

A figura seguinte representa a evolução anual dos factores limitantes do crescimento das macroalgas no sistema, onde se verifica que, efectivamente, a limitação principal ao seu crescimento é devida à falta de nutrientes.



Figura 38 – Evolução anual dos factores limitantes do crescimento das macroalgas.

Relativamente ao fitoplâncton é também possível analisar a diferença entre a evolução anual dos factores limitantes COM e SEM macroalgas (Figura 39). A limitação do crescimento de fitoplâncton provocada pela falta de luz é menor na presença de macroalgas, o que seria um resultado previsível, tendo em conta os resultados discutidos anteriormente. O factor de

extinção da luz na água foi, com a presença de macroalgas, bastante diminuído, uma vez que depende exclusivamente das concentrações fitoplâncton atingidas e estas foram reduzidas devido à falta de nutrientes. Aliás, o factor limitante devido aos nutrientes, também representado na figura, apresenta uma redução muito significativa em determinadas alturas do ano. É ainda interessante observar que, em geral, para ambos os factores limitantes a variação sazonal foi atenuada com a presença de macroalgas. De facto, a variação de fitoplâncton ao longo do ano é menos significativa no cenário com macroalgas, pelo que, todos os processos relacionados com a sua concentração apresentam igualmente menor variação sazonal, relativamente a um cenário sem macroalgas. A evolução do factor limitante total é muito similar à evolução do factor limitante de nutrientes, confirmando-se que a falta de nutrientes na Ria de Aveiro provoca uma limitação no crescimento do fitoplâncton em mais de 50%.



Figura 39 - Evolução anual dos factores limitantes do crescimento do fitoplâncton(COM e SEM macroalgas).

A Figura 40 apresenta as estações de amostragem, utilizadas nas campanhas realizadas por Henrique Queiroga, no âmbito do projecto *ModelRia*, nos dias 20 de Junho, 25 de Setembro

e 15 de Dezembro de 2000 e 14 de Março de 2000, cujos registos, são utilizados para a validação dos resultados do modelo. Numa primeira abordagem, a validação é feita através da comparação dos registos com a série temporal de valores obtida pelo modelo (nos dois cenários em análise, COM e SEM Macroalgas), para a célula da malha correspondente à localização da estação (Figura 41 até Figura 46). Em cada uma das figuras é apresentado um gráfico para cada propriedade em estudo, excepto para as propriedades fitoplâncton e zooplâncton⁴. As diferentes ordens de grandeza destas propriedades entre os dois cenários de simulação justificam a apresentação de um gráfico adicional, que permite uma análise mais pormenorizada dos resultados da simulação COM Macroalgas.



Figura 40 - Estações de amostragem (ModelRia) utilizadas para a validação dos resultados do MOHID.

⁴ Os valores de Zooplâncton utilizados na comparação com os resultados do modelo foram calculados a partir das densidades de indivíduos pertencentes ao grupo copépodes (nauplius, juvenis e adultos) e ao grupo ciliados encontradas nas amostras (utilizando uma rede de 64μm).





























Figura 43 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR3 (Murtosa).



















Figura 45 - Resultados obtidos pelo modelo na Estação MR6 (Vista Alegre).













A escassez de dados de campo não permite uma validação completa dos resultados do modelo, uma vez que em muitas das propriedades analisadas existe uma variação sazonal bastante acentuada e apenas quatro datas de amostragem. No entanto, é possível dizer que os resultados do modelo obtidos na simulação COM macroalgas, se aproximam de uma forma mais satisfatória dos registos nas várias estações, face à simulação SEM macroalgas, à excepção dos valores de nitrato, onde os resultados da simulação com macroalgas parecem ser sistematicamente inferiores aos registos.

3. Análise dos Valores Médios Anuais

As duas simulações do modelo (COM e SEM macroalgas) foram levadas a cabo considerando condições fronteira (descargas dos rios e maré) frequentes, obtidas por análise estatística de séries temporais de registos em estações de amostragem na Ria de Aveiro (descritas em maior pormenor no Anexo III), o que sugere que os resultados do modelo dificilmente serão capazes de reproduzir de uma forma tão precisa, como a necessária na abordagem anterior, os valores registados (determinado valor em determinado dia do ano)⁵. A validação do modelo seguindo a abordagem anterior encontra-se ainda dificultada pelo facto de existir uma grande variabilidade espacial das propriedades na Ria de Aveiro (analisada no ponto 1 deste capítulo), o que significa que é exigida uma precisão muito elevada na escolha da célula que corresponde à estação de amostragem. Face a esta situação, uma abordagem adequada à validação dos resultados do modelo passa pela comparação dos valores médios anuais, calculados pelo modelo nas várias caixas de integração, com os valores de campo registados, englobando as várias estações de amostragem localizadas no interior dessas mesmas caixas. É neste sentido que são apresentados os gráficos representados desde a Figura 48 até Figura 52. Como valores de campo são utilizados os

⁵ Optou-se neste estudo por simular um ano cujas condições se consideram mais frequentes, uma vez que não existem todos os dados necessários (caudal e concentrações de propriedades) para uma simulação precisa do ano 2000.

registos das campanhas resultantes do projecto ModelRia (estações denominadas por MR na Figura 47) e os registos de estações utilizadas em campanhas realizadas pelo Instituto Hidrográfico (estações RA na figura), cujos valores se encontram disponíveis apenas em termos de valor médio anual entre os anos de 1989 e 1993 (IDAD, 94) e uma medição muito recente em Fevereiro de 2002 (IH, 2002).



Figura 47 – Estações de amostragem utilizadas para a validação dos resultados do MOHID.



Figura 48 - Concentração média anual de fitoplâncton obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.



Figura 49 – Concentração média anual de zooplâncton obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.



Figura 50 - Concentração média anual de amónia obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.



Figura 51 - Concentração média anual de nitrato obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.



Figura 52 - Concentração média anual de oxigénio obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.

Em termos de fitoplâncton (Figura 48) os resultados obtidos pelo modelo, na simulação que considera a existência de macroalgas, são claramente mais satisfatórios relativamente a uma simulação apenas com fitoplâncton. Tal como foi já referido, a existência de mais um produtor primário no sistema implica uma diminuição na quantidade de nutrientes disponíveis para o fitoplâncton, provocando certamente uma limitação significativa no seu

crescimento. A Figura 53 permite estabelecer uma melhor comparação entre os valores médios anuais obtidos em cada uma das simulações, para cada caixa de integração, na qual se identificam diferenças muito importantes, não só na concentração de fitoplâncton, mas também de zooplâncton, nitrato e azoto orgânico total. A concentração de zooplâncton no sistema depende fundamentalmente da quantidade de fitoplâncton e, apresentando-se esta com um valor inferior na presença de macroalgas, também o zooplâncton apresenta uma diferença muito significativa (Figura 49)Quanto às concentrações de nitrato, a Figura 53 verifica a importância do consumo de nitrato por parte das macroalgas, que reduz as concentrações de nitrato a níveis muito baixos, relativamente à simulação SEM macroalgas e também face aos valores de campo registados (Figura 51).

No caso da amónia, a Figura 53 mostra uma diminuição da concentração média anual no caso da simulação COM macroalgas em praticamente todas as caixas de integração. Esta diminuição é, no entanto inferior à provocada na concentração de nitrato, devido fundamentalmente às excreções das macroalgas que assumem assim um importante papel de fonte de amónia no sistema. Os valores de amónia obtidos pelo modelo, nas duas simulações são bastante satisfatórios quando comparados com os valores de campo registados (Figura 50).

Quanto ao oxigénio (Figura 52) os valores obtidos pelo modelo são superiores aos valores registados nas várias estações de amostragem, embora no caso da simulação SEM macroalgas se apresentem mais próximos dos registos. As diferenças entre as duas simulações encontram-se na Figura 53 onde se verifica que, em algumas das caixas consideradas, a existência de mais um organismo fotossintético é importante para o aumento de oxigénio no sistema.

Em termos de azoto orgânico total (Figura 53), que inclui o azoto orgânico dissolvido e particulado, pelo facto de este ser um produto presente nas excreções tanto do fitoplâncton como das macroalgas, à semelhança da amónia, a sua concentração é significativamente aumentada quando se considera a existência de macroalgas no sistema.



Figura 53 – Valores médios anuais de concentração obtidos pelo modelo (COM e SEM macroalgas).

Na Figura 54 encontra-se a comparação entre os valores obtidos para a concentração de sedimentos na água e os valores de campo registados nas estações utilizadas pelo IH, apresentadas anteriormente na Figura 47. Da sua observação pode referir-se que, embora satisfatórias, as concentrações de sedimentos calculadas pelo modelo parecem ser sistematicamente inferiores aos valores de campo. De facto, para a simulação do transporte de sedimentos na Ria de Aveiro não foi considerado o efeito das ondas sob a tensão de corte no fundo (uma vez que implicaria estudos adicionais), tendo-se optado por considerar uma velocidade de queda dos sedimentos inferior ao valor que seria aceitável, simulando indirectamente este efeito. A Figura 54 demonstra que o efeito das ondas pode ser

significativo e que para obter valores mais próximos dos valores de campo seria necessário diminuir ainda mais a velocidade de queda ou, a solução mais desejável, proceder a um estudo mais completo sobre este efeito.



Figura 54 - Concentração média anual de sedimentos obtida pelo modelo vs. medidas de campo registadas.

4. Fluxos Anuais entre Zonas

A Figura 55 representa, para cada propriedade, a comparação entre os fluxos médios anuais de massa entre caixas de integração, para as simulações COM e SEM macroalgas. De uma maneira geral, as trocas de massa das várias propriedades entre caixas reflectem as diferenças já discutidas anteriormente. Ou seja, o fluxo de massa de fitoplâncton trocado entre as caixas, bem como os fluxos de nitrato e amónia, são substancialmente menores quando existem macroalgas no sistema, enquanto que os fluxos azoto orgânico dissolvido e particulado são aumentados, não se alterando, no entanto, na maior parte dos casos, o sentido do fluxo.





5. Balanço Global de Azoto na Ria de Aveiro

Na Figura 56 encontram-se representados os balanços totais de algumas propriedades, para as duas simulações em análise, ou seja, a diferença entre o fluxo total de entrada e saída da Ria de Aveiro.


Figura 56 – Balanço total das propriedades (COM e SEM macroalgas).

O balanço de fítoplâncton indica um resultado previsível, tendo em conta os resultados já analisados: a produção de fítoplâncton no interior do estuário foi substancialmente diminuída na presença de macroalgas no sistema, no entanto o balanço indica em ambos os casos um balanço total de biomassa de fítoplâncton positivo no interior da Ria de Aveiro, isto é, a quantidade de biomassa de fítoplâncton que sai da Ria é mais elevada do que a de entrada. Relativamente aos nutrientes, amónia e nitrato, com a existência de macroalgas, o sistema passou a consumir mais nutrientes, sendo o fluxo de saída do estuário muito inferior ao de entrada. Em termos de matéria orgânica, representada na forma de azoto, na simulação COM macroalgas existe, como seria de esperar, um aumento considerável no seu fluxo de saída. Note-se que este aumento no fluxo de saída de matéria orgânica deve-se principalmente à contribuição de DON, uma vez que o PON produzido, sendo uma propriedade particulada, apresenta uma tendência para a sedimentação no interior da Ria. É ainda importante referir que grande parte da biomassa produzida na Ria de Aveiro não é transportada para o mar, pois corresponde à massa de macroalgas que permanece no interior da Ria.

V. FERRAMENTA WEBGIS PARA GESTÃO DE DADOS

A organização e armazenamento dos diversos dados de campo obtidos nas campanhas de amostragem na Ria de Aveiro, tal como em qualquer outro sistema, revela-se indispensável, dada a grande quantidade de estudos e projectos já desenvolvidos. Os vários dados recolhidos ao longo de décadas podem muitas vezes ser fundamentais para a compreensão da dinâmica natural do sistema ecológico e para a implementação de práticas de gestão de recursos adequadas. Neste sentido, foi desenvolvida uma aplicação WEBGIS para a Ria de Aveiro (Figura 57) que, tendo em conta todas as capacidades dos sistemas WEB actuais, se revela como uma solução efectiva para a organização e gestão de dados recolhidos na Ria de Aveiro.

A aplicação, construída em ambiente DOTNET permite, utilizando várias linguagens de programação (asp.net, html, java script e Visual Basic), aceder e pesquisar, de modo fácil, os dados contidos numa base de dados, construída em Access, onde se encontram armazenados de forma organizada todos os dados de campo disponíveis. A pesquisa de dados é nesta aplicação gerida através de um sistema servidor-cliente, onde toda a informação se encontra centralizada num servidor desta forma o problema de gestão de versões da base de dados e o cliente pode facilmente aceder a ela através da Internet.

Para além da componente de armazenamento e pesquisa de dados, a aplicação WEBGIS permite ainda a sua exploração gráfica com um sistema tipo "Sistema de Informação Geográfica" através da utilização da tecnologia MapServer (<u>http://mapserver.gis.umn.edu/home.html</u>). Uma aplicação SIG deste tipo permite, assim, avançar para além da gestão e armazenamento de dados, visualizando a sua localização geográfica durante o processo de consulta.



Figura 57 – Apresentação da ferramenta WEBGIS para a gestão e pesquisa de dados na Ria de Aveiro.

Esta aplicação permite pesquisar os dados que dizem respeito a parâmetros (Figura 58) e campanhas (Figura 59). A Figura 60 e Figura 61 são exemplos da utilização da aplicação.



Figura 58 – Acesso a pesquisa de dados de Parâmetros

Pesquis	a por Campanha
SELECCIONE O TIPO DE CAMPANHA	Universidade de Aveiro
SELECCIONE O DIA DE CAMPANHA	terça-feira, 20 de Junho de 2000 terça-feira, 20 de Junho de 2000 segunda-feira, 25 de Setembro de 2000 sexta-feira, 15 de Dezembro de 2000 quarta-feira, 14 de Março de 2001

Figura 59 – Acesso a pesquisa de dados de Campanhas



Figura 60 – Exemplo de utilização da aplicação WEBGIS: localização georeferenciada das estações de amostragem.

o amoniac Imo N/I 1	al Prof. [m]	Ponto	Hora Ibb:mm	Data [dd-mm-aa]	Promotor
0.280	0.00	RA12	17:25	22-02-2002	INAG
0.084	1.70	MR6	16:30	20-06-2000	ModelRia
0.087	1.70	MR6	17:15	25-09-2000	ModelRia
0.134	1.70	MR6	12:50	25-09-2000	ModelRia
0.161	0.20	MR6	10:10	15-12-2000	ModelRia
0.153	1.70	MR6	16:40	15-12-2000	ModelRia
0.106	1.70	MR6	09:55	14-03-2001	ModelRia
0.091	1.70	MR6	16:50	14-03-2001	ModelRia
- A	15		N.		

Figura 61 – Exemplo de resultado da pesquisa de dados de Azoto Amoniacal.

Esta ferramenta pode ser consultada em <u>www.mohid.com/GIS/Aveiro</u> e o seu acesso só é permitido mediante a introdução de um "username" e uma "password". O cumprimento dos objectivos com que foi construída esta aplicação depende agora apenas dos utilizadores.

CONCLUSÕES

A Ria de Aveiro possui um tempo de residência na ordem dos 20 dias, o que parece ser suficiente para permitir o desenvolvimento dos principais processos biológicos. A existência de macroalgas na Ria de Aveiro torna o sistema mais produtivo, produzindose no seu interior maior quantidade de biomassa, e consumindo praticamente todos os nutrientes existentes no meio.

A maior parte da biomassa de produtores primários existente no interior da Ria de Aveiro localiza-se em zonas próximas das descargas de água doce (rios e valas de drenagem), onde as concentrações de nutrientes são mais elevadas e as velocidades de escoamento menores. Segundo os resultados do modelo, a quantidade de biomassa de macroalgas é cerca de 50 vezes superior à de fitoplâncton, o que significa que as macroalgas se encontram mais adaptadas a este tipo de sistema. As macroalgas possuem a capacidade de fixação a um substrato, o que lhes permite permanecer mais tempo no interior da Ria, reflectindo-se num maior aproveitamento dos poucos nutrientes disponíveis na coluna de água, ao contrário do fitoplâncton que é transportado pela água.

Sendo a falta de nutrientes na água o principal factor limitante da produção primária de biomassa na Ria de Aveiro (comprovado pela análise dos resultados obtidos pelo modelo), a predominância de macroalgas face a fitoplâncton verifica a importância do tempo de residência dos organismos no interior do sistema. No caso do fitoplâncton o tempo de residência no interior da Ria é apenas dependente do transporte da água, correspondendo, desta forma, aos 20 dias necessários para a renovação da água. Para as macroalgas o tempo de residência na Ria de Aveiro é igualmente dependente do campo de velocidades da água, mas de uma forma diferente, definindo apenas as suas zonas de estabelecimento, sendo a sua morfologia e a capacidade de fixação os principais factores dos quais depende o seu tempo de residência. No entanto, o "lento"

crescimento das macroalgas, cuja estabilização demora mais do que quatro anos a ser cumprida (nas condições deste estudo), sugere ainda que este não será o produtor primário mais adequado a este sistema. Um organismo capaz de utilizar nutrientes, não só da coluna de água mas também do solo, tal como acontece com algumas espécies de macrófitas, terá à partida uma capacidade de produção de biomassa maior, uma vez que ficará menos dependente da pouca disponibilidade de nutrientes na água.

A presença de macroalgas nas simulações do modelo, aproximaram em geral, os resultados teóricos aos valores de campo registados, o que concretiza um dos principais objectivos do estudo. Mas o estudo sugere também que a modelação ecológica da Ria de Aveiro requer novos desenvolvimentos no sistema MOHID, no sentido de permitir a simulação dos processos relacionados com a existência de macrófitas no sistema, e, desta forma, modelar a conhecida actividade do *moliço* na Ria de Aveiro.

Referências Bibliográficas

- BONEY, A. D., 1975. Phytoplankton. The Institute of Biology's studies in Biology, No.52. Edward Arnold (Publs.) Ltd.. England. p. 116.
- DIAS, J. M., J. F., Lopes, I. Dekeyser, 1999. Hydrological characterization of Ria de Aveiro, Portugal, in early Summer. Oceanological Acta. 22. 473-485.
- EPA, 2001. Nutrient Criteria Technical Guidance Manual.
- IH (Instituto Hidrográfico), 2002. Divisão Química e Poluição do Meio Marinho. Relatório Progresso de Trabalho. RELPT.QP 05/02. Monitorização das principais zonas estuarinas da costa de Portugal Continental.
- IHRH (Instituto de Hidráulica e Recurso Hidrícos), 1994. Estudo de Avaliação da Vulnerabilidade da Capacidade de Recepção das Águas Costeiras em Portugal. Relatório R3.2. Meios Receptores e suas características: (Be1) – Ria de Aveiro, Pateira de Fermelos e Barrinha de Mira.
- INAG, 2001 Definição do Limite de Jusante dos Estuários Portugueses.
- MODELRIA, 2001. Relatório de Progresso do projecto Model Ria. Modelação da Qualidade da Água da Laguna da Ria de Aveiro.
- PINA, P., 2001. An Integrated Approach to Study The Tagus Estuary Water Quallity. Dissertação para a obtenção do Grau de Mestre em Ecologia, Gestão e Modelação dos Recursos Marinhos. Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.
- PORTELA, L., 1996. Modelação matemática de processos hidrodinâmicos e de qualidade da água no Estuário do Tejo. Dissertação para obtenção do Grau de Doutor em Engenharia do Ambiente. Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.
- TRANCOSO, A., 2002. Modelling MacroAlgae in Estuaries. Trabalho Final de Curso da Licenciatura em Engenharia do Ambiente. Instituto Superior Técnico. Universidade Técnica de Lisboa.

Anexo I

Descrição do Modelo

Table of Contents

1	GENERAL OVERVIEW 1-8
1.1	Introduction1-8
1.2	History1-8
1.3	Actual State 1-9
1.4	Applications1-11
2	THE MODEL MODULE2-12
2.1	Introduction2-12
2.2	Coordination of the execution of one model2-12
2.3	Coordination of the father son communication 2-13
3	THE BATHYMETRY MODULE
3.1	Introduction
4	THE GEOMETRY MODULE 4-15
4.1	Introduction 4-15
4.2	Finite Volume 4-15
4.3	Vertical Coordinates4-17
5	THE HYDRODYNAMIC MODULE 5-19
5.1	Introduction5-19
5.2	Equations

5.3 Dis	cretization	5-21
5.3.1	Spatial discretization: Finite volume approach	5-21
5.3.2	Temporal discretization: semi-implicit ADI algorithm	5-21
5.3.3	Discretization of the different processes	5-22
5.3.3.	1 Free surface equation	5-23
5.3.3.	2 Velocity equation	5-23
5.3	3.2.1 Coriolis term	5-24
5.3	3.2.2 Advective terms	5-24
5.3	3.2.3 Barotropic pressure gradient	5-25
5.3	3.2.4 Baroclinic pressure gradient	5-25
5.3	3.2.5 Horizontal diffusive fluxes	5-25
5.3	3.2.6 Vertical diffusion	5-26
5.4 Bo	undary conditions	5-26
5.4.1	Free surface	5-26
5.4.2	Bottom boundary	5-27
5.4.3	5 4 3 Lateral closed boundaries	
5.4.4	Open boundaries	5-28
5.4.5	Moving boundaries	5-28
6 THE	LAGRANGIAN MODULE	6-30
6.1 Int	roduction	6-30
6.2 Tra	acer concept	6-31
6.3 Eq	uations	6-32
6.3.1	Tracer Movement	6-32
6.3.2	Turbulent Diffusion	6-33
6.3.3	Mass Decay rate	6-34
6.3.4	Monitoring Boxes	6-34
7 THE	OIL MODULE	7-37
7.1 Int	roduction	7-37

7.2	Implementation	
7.3	Equations	
7.3.	1 Spreading	
7.3.	2 Density	
7.3.	3 Viscosity	
7.3.	4 Evaporation	
7.3.	5 Emulsification	
7.3.	6 Dispersion	
7.3.	7 Sedimentation	
7.3.	8 Dissolution	
7.3.	9 Oil-Beaching	
7.3.	10 Removal techniques	
7	.3.10.1 Chemical Dispersion	
7	.3.10.2 Mechanical Cleanup	
8.2	Equations	
8.2.	1 Transport	
8.2.	2 Density	
9 Т	HE WATER QUALITY MODULE	
9.1	Introduction	
9.2	The general model	
9.3	Phytoplankton	
9.3.	1 Nutrient limitation	
9.3.	2 Temperature limitation	
9.3.	3 Light limitation	
9	.3.3.1 Light extinction in water	
9	.3.3.2 Phytoplankton reaction to light	

9.3.4	Equations	
9.4 N	MacroAlgae	
9.4.1	Light Limiting Factor	
9.4.2	Nutrients Limitation Factor	
9.4.3	Respiration	
9.4.4	Excretion	
9.4.5	Natural Mortality	
9.5 Z	Looplankton	
9.5.1	Equations	
9.6 N	Nitrogen	9-75
9.6.1	Ammonia	
9.6.2	Nitrite	
9.6.3	Nitrate	
9.6.4	Particulate organic nitrogen – PON	
9.6.5	Dissolved organic nitrogen non refractory – DONn	r 9-80
9.6.6	Dissolved organic nitrogen refractory – DONre	
9.7 P	Phosphorus	
9.7.1	Inorganic Phosphorus	
9.8 C	Dxygen	9-84
10 T	THE SURFACE MODULE	10-85
10.1 I	ntroduction	10-85
10.2 V	Wind	10-85
10.3 H	Ieat fluxes	10-86
10.3.1	Solar radiation	
10.3	3.1.1 Radius vector, <i>r</i>	
10.3	3.1.2 Solar High	
10.3	3.1.3 Direct Radiation	10-88

1	0.3.1	.4 Diffuse radiation	
10.3	3.2	Infrared radiation flux	
10.3	3.3	Latent heat flux	
10.3.4 Sensible heat flux		Sensible heat flux	
10.4	Gas	s flux	10-90
11	тні	E HYDRODYNAMIC FILE MODULE	11-92
11.1	Inti	roduction	11-92
11.2	Me	thodology	
11.2	2.1	Integration of the bathymetry	
11.2	2.2	Integration of the water fluxes	
12	BIB	SLIOGRAPHY	12-96
12.1	Ger	neral Overview	
12.2	The	e Geometry Module	
12.3	The	e Hydrodynamic Module	
12.4	The	e Lagrangian Module	
12.5	The	e Module Oil	
12.6	The	e Water Properties Modules	
12.7	The	e Water Quality Module	
12.8	The	e Surface Module	

Table of Figures

Figure 2-1: Information flux between the nested models	2-12
Figure 3-1: Information flux between the module bathymetry and other modules	3-14
Figure 4-1: Information flux between the Geometry Module and other modules	4-15
Figure 4-2: Finite volume element of MOHID model	4-17
Figure 4-3: Sigma domain with 4 Layers	4-17
Figure 4-4: Cartesian domain with 4 Layers (shaved cells)	4-18
Figure 4-5: Sub-division of the water column in a Cartesian domain (inferior) and a Sigma (superior)	domain 4-18
Figure 5-1: Information flux between the Hydrodynamic Module and other modules	5-19
Figure 6-1: Information flux between the Lagrangian module and other modules	6-31
Figure 6-2: Random movement forced by an eddy larger than the particle	6-33
Figure 6-3: Random movement forced by an eddy larger than the particle	6-33
Figure 7-1 Information flux between the oil module and other modules	7-38
Figure 8-1: Information flux between the Water Properties Module and other modules	8-52
Figure 9-1: Information flux between the water quality module and other modules	9-56
Figure 9-2: Internal Flux of Phytoplankton	9-66
Figure 9-3– Internal flux of MacroAlgae	9-69
Figure 9-4: Internal Flux of Zooplankton	9-74
Figure 9-5: Internal Flux of Ammonia	9-76
Figure 9-6: Internal Flux of Nitrite	9-78
Figure 9-7: Internal Flux of Nitrate	9-79
Figure 9-8: Internal Flux of PON	9-80
Figure 9-9: Internal Flux of DONnr	9-81
Figure 9-10: Internal Flux of DONre	9-82
Figure 9-11: Internal Flux of Inorganic Phosphorus	9-83

Figure 9-12: Internal Flux of Inorganic Oxygen	9-84
Figure 10-1: Information flux between the Surface Module and other modules	10-85
Figure 11-1: Schematic representation of the space integration	11-92
Figure 11-2: Information flux between the Hydrodynamic File Module and other modules	11-93
Figure 11-3: Integration of the bathymetry using the "Mean Integration"	11-94
Figure 11-4: Integration of the bathymetry using the "Maximum Integration"	11-95
Figure 11-5: Schematic representation of the water flux integration	11-95

Table of Tables

Table 1.3-1: Principal modules of the model Mohid	1-10
Table 9.3-1: Values used in the standard model for the phytoplankton variable	9-68
Table 9.4-1: Values used in the standard model for the macroalgae variables	9-73
Table 9.5-1: Values used in the standard model for the zooplankton variable	9-75
Table 9.6-1: Values used in the standard model for the nitrogen variables	9-82

1 General Overview

1.1 Introduction

This document describes the three-dimensional water modeling system *Mohid.* The *Mohid* system is composed by a free surface three dimensional baroclinic hydrodynamic module, a eulerian transport module, a lagrangian transport module, a turbulence module, a zero-dimensional water quality module and an oil dispersion model.

Actually the principal investigators are Ramiro Neves, Paulo Chambel Leitão and Frank Braunschweig, from the Technical University of Lisbon. Contributions from Henrique Coelho, Manuel Villarreal (Turbulence) and Pedro Pina (Water Quality) are also included in the model. A lot of other investigator have given there contribution to this model over the past years.

1.2 History

The development of the Mohid model started back in 1985, passing since this time through continuously updates and improvements due to its use during different projects of scientific research and engineering projects. Initially the Mohid water modeling system was a bi-dimensional hydrodynamic model, called Mohid 2D (Neves, 1985). This model was used to study estuaries and coastal areas using a classical finite difference approach. In the following years, a bi-dimensional eulerian and lagrangian transport model were included in this model. The first three-dimensional was introduced by Santos (1995), which used a vertical double Sigma coordinate. This version was called Mohid 3D. The limitations of the double Sigma coordinate revealed the necessity to develop a model which could use a generic vertical coordinate, permitting the user to choose the type of vertical coordinate, depending on the study area. Due to this necessity the concept of finite volumes was introduced with the version Mesh 3D by Martins (1999). In the Mesh 3D model were included a three dimensional eulerian transport model, a three dimensional lagrangian transport model (Leitão, 1996) and the zero-dimensional water quality model (Miranda, 1999). Since the introduction of the finite volumes approach, this discretization remains in the model *Mohid*.

1.3 Actual State

With the growing model complexity, it was necessary to introduce a new way in the organization of the information of the *Mohid* model. In 1998 the whole code was submitted to a complete rearrangement, using new the feature of programming languages and also the capacities of the computer to reprogram the whole *Mohid* model. The main goal of this rearrangement was to turn the model more robust, reliable and protect its structure against involuntary programming errors, so it would be more easily "grow able". To achieve this goal, objected oriented programming in FORTRAN was introduced to the *Mohid* model, like described in Decyk (Decyk, *et al.*, 1997).

The philosophy of the new *Mohid* model (Miranda, *et al.*, 2000), further on simple designated *Mohid*, permits to use the model in any dimension (one-dimensional, two-dimensional or three-dimensional). The whole model is programmed in ANSI FORTRAN 95, using the objected orientated philosophy. The subdivision of the program into modules, like the information flux between these modules was object of a study by the *Mohid* authors.

Actually the model *Mohid* is composed by over 40 modules which complete over 150 mil code lines. Each module is responsible to manage a certain kind of information. The main modules are the modules listed in Table 1.3-1.

Another important feature of *Mohid* is the possibility to run nested models. This feature enables the user to study local areas, obtaining the boundary conditions from the "father" model. The number of nested models is just limited by the available computer power.

Module Name	Module Description
Model	Manages the information flux between the hydrodynamic module and the two transport modules and the communication between nested models.
Hydrodynamic	Full 3D dimensional baroclinic hydrodynamic free surface model. Computes the water level, velocities and water fluxes.
Water Properties	Eulerian transport model. Manages the evolution of the water
(Eulerian Transport)	properties (temperature, salinity, oxygen, etc.) using a eulerian approach.
Lagrangian	Lagrangian transport model. Manages the evolution of the same properties as the water properties module using a lagrangian approach. Can also be used to simulate oil dispersion.
Water Quality	Zero-dimensional water quality model. Simulates the oxygen, nitrogen and phosphorus cycle. Used by the eulerian and the lagrangian transport modules. Based on a model initially developed by EPA (Bowie, <i>et. al.</i> , 1985).
Oil Dispersion	Oil dispersion module. Simulates the oil spreading due thickness gradients and internal oil processes like evaporation, emulsification, dispersion, dissolution and sedimentation.
Turbulence	One-dimensional turbulence model. Uses the formulation from the GOTM model.
Geometry	Stores and updates the information about the finite volumes.
Surface	Boundary conditions at the top of the water column.
Bottom	Boundary conditions at the bottom of the water column.
Open Boundary	Boundary conditions at the frontier with the open sea.
Discharges	River or Anthropogenic Water Discharges
Hydrodynamic File	Auxiliary module to store the hydrodynamic solution in an external file for posterior usage.

Table 1.3-1: Principal modules of the model Mohid

1.4 Applications

The MOHID model has been applied to different coastal and estuarine areas and it has showed its ability to simulate complex features of the flows. Several different coastal areas have been modeled with MOHID in the framework of research and consulting projects. Along the Portuguese coast, different environments have been studied, from river mouths (Douro, Mondego) to coastal lagoons (Ria de Aveiro, Ria Formosa) and broader estuaries (Tagus and Sado estuaries (Martins et al. [2000])). Also the model has been adapted to simulate Galician Rías hydrodynamics (Ría de Vigo (Taboada et al., [1998], Montero et al. [1999], Montero, [1999]), Ría de Pontevedra (Taboada et al. [2000], Villarreal et al. [2000]) and other Rías (Pérez Villar et al. [1999])). Far from the Atlantic coast of the Iberian Peninsula, some European estuaries have been modeled -Western Scheldt (Holland), Gironde (France) (Cancino and Neves, [1999]) and Hellingford (Leitão, [1997])-as well as some coastal estuaries in Brasil (Santos, Fortaleza). Regarding to open sea, MOHID has been applied to the North-East Atlantic region where some processes including the Portuguese coastal current (Coelho et al. [1994]), the slope current along the shelf (Neves et al. [1998]) and the generation of internal tides (Neves et al. [1998]) have been studied and also to the Mediterranean Sea to simulate the seasonal cycle (Taboada, [1999]) or the circulation in the Alboran Sea (Santos, [1995]). More recently Mohid has been applied to the Portuguese Monte Novo, Roxo and Algueva reservoirs (Braunschweig, 2001).

2 The Model Module

2.1 Introduction

The module Model is the topmost module of the *Mohid* water modeling system and has two main responsibilities, the coordinates of the execution of the hydrodynamic module and the transport modules and the coordination of the father-son communication between nested models. Figure 2-1 shows this coordination.



Figure 2-1: Information flux between the nested models

2.2 Coordination of the execution of one model

The coordination of the execution of one model consists of the actualization of the global model time and the update of the hydrodynamic

module and the transport models within one model. The transport modules can run with different time steps of the hydrodynamic module (since the time steps of the transport modules are multiplies of the hydrodynamic time step).

2.3 Coordination of the father son communication

The coordination of the information flux between the nested models includes the synchronization between different nested models, once nested models can also run with different time steps. The coordination of the nested models is done in a hierarchical way. Every model can have one or more nested child models, which recursively can have one or more child models. All the communication is done in one way direction, passing the boundary conditions from the father model to the son(s) model(s).

3 The Bathymetry Module

3.1 Introduction

The module Bathymetry is one of the lowest modules of the *Mohid* water modeling system. It has basically reads the bathymetric data from an ASCII input file and publishes this data to all client modules.



Figure 3-1: Information flux between the module bathymetry and other modules

The bathymetric data can be stored in any regular grid, with variable spacing along the X and the Y direction. For every grid point the depth of this point must be given. The horizontal coordinates can be supplied in different types of coordinates. Most common used are metric coordinates and geographic coordinates.

4 The Geometry Module

4.1 Introduction

The Geometry Module computes the lateral areas and volumes of the finite volume, based upon the surface elevation and the bathymetric data. This information is updated as needed, and published to the other modules of the *Mohid* model. Figure 4-1 represents the information flux between the geometry module and other modules.



Figure 4-1: Information flux between the Geometry Module and other modules

4.2 Finite Volume

The model *Mohid* uses a finite volume approach (Chippada et al. [1998]; Martins et al. [1999], [2000]) to discretize the equations. In this approach, the discrete form of the governing equations is applied macroscopically to a cell control volume. A general conservation law for a scalar U, with sources Q in a control volume Ω is then written as:

$$\partial_t \int_{\Omega} U d\Omega + \oint_{S} \vec{F} d\vec{S} = \int_{\Omega} Q d\Omega$$
 Eq. 4-1

where *F* are the fluxes of the scalar through the surface *S* embedding the volume. After discretizing this expression in a cell control volume Ω_j where U_j is defined, we obtain:

$$\partial_t (U_j \Omega_j) + \sum_{faces} \vec{F} \cdot \vec{S} = Q_j \Omega_j$$
 Eq. 4-2

In this way, the procedure for solving the equations is independent of cell geometry. Actually, the cell can have any shape with only some constraints (see *Montero [1999]* or *Martins [2000]*) since only fluxes among cell faces are required. Therefore, a complete separation between physical variables and geometry is achieved (*Hirsch, [1988]*). As volumes can vary in the course of the calculus, geometry is updated in every time step after computing the physical variables. Moreover, the spatial coordinates are independent, and any geometry can be chosen for every dimension. Cartesian or curvilinear coordinates can be used in the horizontal and a generic vertical coordinate with different sub-domains can be used in the vertical. This general vertical coordinates (Cartesian, sigma, isopycnal) as pointed in (*Martins et al. [2000]*).

The volume element used in the model MOHID is shown in Figure 4-2. Only a vertical degree of freedom is allowed, and the grid is Cartesian orthogonal in the horizontal. The grid is staggered in the horizontal in an Arakawa C (*Arakawa and Lamb, [1977]*) manner, i.e. horizontal velocities are located in the center of the west (u-velocity) and south (v-velocities) faces, while elevation, turbulent magnitudes and tracers are placed in the center. Also a staggering in the vertical is used, with vertical velocity w, tracers and turbulent magnitudes vertically placed in the top and bottom faces and horizontal velocities and elevation in the center of the element (in vertical).



Figure 4-2: Finite volume element of MOHID model

4.3 Vertical Coordinates

Actually the module Geometry can divide the water column in different vertical coordinates: Sigma, Cartesian, Lagrangian (based on Sigma or based on Cartesian), "Fixed Spacing" and Harmonic. A subdivision of the water column into different domains is also possible. The Sigma and the Cartesian coordinates are the classical ones. The Cartesian coordinate can be used with or without "shaved cells". The Lagrangian coordinate moves the upper and lower faces with the vertical flow velocity. The "Fixed Spacing" coordinate allows the user to study flows close to the bottom and the Harmonic coordinate works like the Cartesian coordinate, just that the horizontal faces close to the surface expand and collapse depending on the variation of the surface elevation. This coordinate was implemented in the geometry module to simulate reservoirs.



Figure 4-3: Sigma domain with 4 Layers



Figure 4-4: Cartesian domain with 4 Layers (shaved cells)



Figure 4-5: Sub-division of the water column in a Cartesian domain (inferior) and a Sigma domain (superior)

5 The Hydrodynamic Module

5.1 Introduction

In this section the hydrodynamic module of the model MOHID is described. The information flux of the hydrodynamic module, relative to the other modules of *Mohid*, is shown in Figure 5-1.





5.2 Equations

The model solves the three-dimensional incompressible primitive equations. Hydrostatic equilibrium is assumed as well as Boussinesq and Reynolds approximations. All the equations below have been derived taken into account these approximations. The momentum balance equations for mean flow horizontal velocities are, in Cartesian form:

$$\partial_{t}u = -\partial_{x}(uu) - \partial_{y}(uv) - \partial_{z}(uw) + fv - \frac{1}{\rho_{0}}\partial_{x}p$$

$$+ \partial_{x}((v_{H} + v)\partial_{x}u) + \partial_{y}((v_{H} + v)\partial_{y}u) + \partial_{z}((v_{t} + v)\partial_{z}u) \qquad \text{Eq. 5-1}$$

$$\partial_{t}v = -\partial_{x}(vu) - \partial_{y}(vv) - \partial_{z}(uw) - fu - \frac{1}{\rho_{0}}\partial_{y}p$$

$$+ \partial_{z}((v_{H} + v)\partial_{x}v) + \partial_{y}((v_{H} + v)\partial_{y}v) + \partial_{z}((v_{t} + v)\partial_{z}v) \qquad \text{Eq. 5-2}$$

Where *u*, *v* and *w* are the components of the velocity vector in the x, y and z directions respectively, *f* the Coriolis parameter, v_H and v_t the turbulent viscosities in the horizontal and vertical directions, v is the molecular kinematic viscosity (equal to 1.3 10^{-6} m² s⁻¹), *p* is the pressure. The temporal evolution of velocities (term on the left hand side) is the balance of advective transports (first three terms on the right hand side), Coriolis force (forth term), pressure gradient (next three terms) and turbulent diffusion (last three terms).

The vertical velocity is calculated from the incompressible continuity equation (mass balance equation):

$$\partial_x u + \partial_y v + \partial_z w = 0$$
 Eq. 5-3

by integrating between bottom and the depth z where w is to be calculated:

$$w(z) = \partial_x \int_{-h}^{z} u dx + \partial_y \int_{-h}^{z} v dy$$
 Eq. 5-4

The free surface equation is obtained by integrating the equation of continuity over the whole water column (between the free surface elevation $\eta(x,y)$ and the bottom -h):

$$\partial_t \eta = -\partial_x \int_{-h}^{\eta} u dz - \partial_y \int_{-h}^{\eta} v dz$$
 Eq. 5-5

The hydrostatic approximation is assumed with:

$$\partial_z p + g\rho = 0$$
 Eq. 5-6

where g is gravity and ρ is density. If the atmospheric pressure p_{atm} is subtracted from ρ , and density ρ is divided into a constant reference density ρ_0 and a deviation ρ' from that constant reference density, after integrating from the free surface to the depth z where pressure is calculated, we arrive to:

$$p(z) = p_{atm} + g\rho_o(\eta - z) + g\int_z \eta \rho' dz \qquad \qquad \text{Eq. 5-7}$$

Eq. 5-7 relates pressure at any depth with the atmospheric pressure at the sea surface, the sea level and the anomalous pressure integrated between that level and the surface. By using this expression and the Boussinesq approximation, the horizontal pressure gradient in the direction x_j can be divided in three contributions:

$$\partial_{x_i} p = \partial_{x_i} p_{atm} - g \rho_0 \partial_{x_i} \eta - g \int_z \eta \partial_{x_i} \rho' dz$$
 Eq. 5-8

The total pressure gradient is the sum of the gradients of atmospheric pressure, of sea surface elevation (barotropic pressure gradient) and of the density distribution (baroclinic pressure gradient). This decomposition of the pressure gradient is substituted in Eq. 5-1 and Eq. 5-2.

The density is obtained from the salinity and from the temperature, which are transported by the water properties module.

5.3 Discretization

5.3.1 Spatial discretization: Finite volume approach

The spatial discretization is described in the geometry module.

5.3.2 Temporal discretization: semi-implicit ADI algorithm

The temporal discretization is carried out by means of a semi implicit ADI (Alternate Direction Implicit) algorithm, introduced by Peaceman and

Racford in 1955 (Fletcher, [1991]). This algorithm computes alternatively one component of horizontal velocity implicitly while the other is calculated explicitly. The resulting equation system is a tridiagonal one that can be solved by Thomas algorithm in an efficient and quick way. This allows preserving the stability advantages of implicit methods without the drawbacks of computational expensiveness and associated phase errors. A longer time-step can therefore be used. Two different discretizations are coded in the model: a 4 equations one with two time levels per iteration-the S21 scheme (Eq. 5-9) by Abbott et al. [1973]- and the 6 equation algorithm by Leendertsee, [1967], more convenient when intertidal zones are to be modeled, since velocities are updated every half time step. The S21 scheme is shown by Eq. 5-9:



Each iteration is divided in two half steps. In the first half step, the free surface elevation η and then one of the horizontal velocities (*u*) are computed in an implicit way. The required value of the other velocity is taken from the previous time step. A vertical velocity w^* is computed from the continuity equation. Then, geometry is updated and the vertical velocity is corrected. The same process is followed in the next half step, but for the other component of horizontal velocity. In this diagram, salinity and temperature are computed each half step. As internal modes are much slower than external modes, *S* and *T* can be updated with a longer time step without losing accuracy and stability.

5.3.3 Discretization of the different processes

A sketch of the discretization will be given below. A full description of the discretization may be found in Martins, [2000] and Montero, [1999].

5.3.3.1 Free surface equation

Free surface elevation is calculated by integrating the continuity equation (Eq. 5-3) over the whole water column. In the finite volume approach, this integration is done via a summation the volume fluxes over all water column cells. For the S21 discretization and the first half time step, it reads:

$$\frac{\eta_{ij}^{t+1/2} - \eta_{ij}^t}{\Delta t/2} =$$

 $-\frac{1}{A_{hij}}\left[\frac{1}{2}\left(\sum_{kbot}^{k\max}U_{ijk}^{t+1}A_{u_{ijk}}^{t}+\sum_{kbot}^{k\max}U_{ijk}^{t}A_{u_{ijk}}^{t}\right)-\frac{1}{2}\left(\sum_{kbot}^{k\max}U_{ij+1k}^{t+1}A_{u_{ij+1k}}^{t}+\sum_{kbot}^{k\max}U_{ij+1k}^{t}A_{u_{ij+1k}}^{t}\right)\right]$

 $\frac{1}{A_{hij}} \left[\frac{1}{2} \left(\sum_{kbot}^{k \max} V_{ijk}^{t+1/2} A_{v_{ijk}}^{t} + \sum_{kbot}^{k \max} U_{ijk}^{t-1/2} A_{v_{ijk}}^{t} \right) - \frac{1}{2} \left(\sum_{kbot}^{k \max} V_{i+1jk}^{t+1/2} A_{u_{i+1jk}}^{t} + \sum_{kbot}^{k \max} U_{i+1jk}^{t-1/2} A_{u_{i+1jk}}^{t} \right) \right]$ Eq. 5-10

where $A_{hij}=DUX_{ij}*DVY_{ij}$ is the area projected on the horizontal plane. Fluxes are temporally averaged, so the calculus is centered in t+1/2. An analogous discretization is carried out for the next half step. The fluxes $U \cdot AU$ and $V \cdot AV$ are obtained from the momentum equation. The discretization of the different terms will be discussed below.

5.3.3.2 Velocity equation

+

If we discretize equation (Eq. 5-1) making use of (**Error! Reference source not found.**) and S21 discretization, we arrive to (an equivalent equation is derived for *v*, Eq. 5-2) for every cell u_{ijk} of the grid:

$$\frac{\Omega_{u_{ijk}}^{t}(U_{ijk}^{t+1} - U_{ijk}^{t})}{\Delta t} + \sum_{m=1}^{N faces} \overrightarrow{F} \overrightarrow{n} A_{m} = f_{u_{ijk}} \Omega_{u_{ijk}}^{t} \overline{V}_{ijk}^{t}$$
Eq. 5-11

where Ω^{t}_{Uijk} is the volume of the computation cell for U_{ijk} and f_{uijk} is the value of the Coriolis parameter for that cell. The value V, t_{ijk}^{t} represents the average value of the *v*-component of the flow on this cell. The second term on the left hand side represents the fluxes of the forces F_m through the surface A_m of the cell *m*. The Coriolis force is the term on the right hand

5-23

side and the other terms in the equation are included in the summation on the left hand side.

5.3.3.2.1 Coriolis term

As we can see on the right hand side of Eq. 5-11, the Coriolis term is discretized explicitly, although it is well-known that this implies a restriction on Δt ($\Delta t \le 2/f$, with *f* the Coriolis parameter). This limitation is not critical for coastal applications -for latitude of 43° $\Delta t \le 2000$ s \approx 5h 30min, that is much bigger than the time steps chosen in these applications.

The other terms in this formulation are seen as fluxes through the surfaces of the control volume, and therefore enter in the second term on the left hand side.

5.3.3.2.2 Advective terms

In order to guarantee momentum conservation, fluxes into the element must have null divergence. This is accomplished by using in the convective terms the same fluxes obtained in the last computation of elevation and vertical velocity. Convective fluxes are computed in every face of the cell:

$$-\sum_{m=1}^{Nfaces} \overrightarrow{F}_m \cdot \overrightarrow{n} A_m = \left[(U \cdot ufluxU)_{ij+1k}^t - (U \cdot ufluxU)_{ijk}^t + (U \cdot ufluxV)_{i+1jk}^t - (U \cdot ufluxV)_{ijk}^t + (U \cdot ufluxW)_{ijk+1}^t - (U \cdot ufluxW)_{ijk}^t \right]$$
Eq. 5-12

with *ufluxU*^{*i*} denotes the flux of *U*^{*i*} through the cell of calculus of *u*. A mixed scheme upwind-central differences is used for computing *ufluxU*^{*i*} (James, [1987], Santos [1995]). Horizontal advective fluxes are discretized explicitly as the restriction that surface waves impose on stability is small for the characteristic range of velocities. The vertical advective term can give problems if the layer thickness is small, as can happen in shallow zones with sigma grids. Two solutions to this problem have been introduced in the model: an implicit discretization or neglecting this term in those regions.

5.3.3.2.3 Barotropic pressure gradient

The restriction of surface waves on stability lead to the implementation of the semi-implicit algorithm so this term limits stability and consequently is discretized implicitly. For the cell u_{ijk} and the first semi-step:

$$-\sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_{m} \cdot \vec{n} A_{m} = \frac{1}{\rho_{0}} \Big[(P_{atm_{ij-1}}^{t+1/2} - P_{atm_{ij}}^{t+1/2}) + \rho_{0} g(\eta_{ij-1}^{t+1/2} - \eta_{ij}^{t+1/2}) \Big] A_{u_{ijk}}^{t}$$
 Eq. 5-13

This expression, when substituted in the equation for the free surface, results in a tridiagonal system, which is solved by Gaussian elimination. In the equation for velocities, the values of η are already known, which allows the explicit discretization of this term for introduction in momentum equations.

5.3.3.2.4 Baroclinic pressure gradient

Internal modes do not introduce a stringent restriction on stability, so they can be discretized explicitly. The fluxes induced by this term through the faces of a uijk cell are:

$$-\sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_{m} \cdot \vec{n} S_{m} = \frac{g}{\rho_{0}} \left(\sum_{l=k+1}^{k\max} (\rho_{ij-1l}^{'t} DWZ_{ij-1l}) + \rho_{ij-1k}^{'t} \Delta z_{ij-1k}^{t} \right) A_{u_{ijk}}^{t}$$

$$- \left(\sum_{l=k+1}^{k\max} (\rho_{ijl}^{'t} DWZ_{ijl}) + \rho_{ijk}^{'t} \Delta z_{ijk}^{t} \right) A_{u_{ijk}}^{t}$$
Eq. 5-14

where Δz^{t}_{ijk} represents the vertical distance from the cell top to the velocity point and arises as a consequence of the vertical staggering of the grid (ρ' is not defined in the same point as the u-velocity).

5.3.3.2.5 Horizontal diffusive fluxes

Horizontal diffusive fluxes are computed in every vertical face of the cell, applying that fluxes are normal to these faces:

$$-\sum_{m=1}^{Njaces} \vec{F}_{m} \cdot \vec{n} A_{m} = (F_{ij-1/2k}^{t} Az x_{ij-1k}^{t} - F_{ij+1/2k}^{t} Az x_{ijk}^{t}) +$$

$$(F_{i-1/2jk}^{t} \frac{Av_{ijk}^{t} + Av_{ij-1k}^{t}}{2} - F_{i+1/2jk}^{t} \frac{Av_{i+1jk}^{t} + Av_{i+1j-1k}^{t}}{2})$$
 Eq. 5-15

Fluxes for x direction are:

$$F_{ij-1/2k} = v_{H_{ij-1k}}^{t} \frac{U_{ijk}^{t} - U_{ij-1k}^{t}}{DUX_{ij-1}}$$
 Eq. 5-16

and for the y-direction:

$$F_{i-1/2\,jk} = v_{H_{i-1/2\,j-1/2\,k}}^{t} \frac{U_{ijk}^{t} - U_{ij-1k}^{t}}{\left(DYY_{ij} + DYY_{i-1\,j}\right)/2}$$
Eq. 5-17

where the horizontal viscosity coefficient v_{H}^{t} is interpolated to the appropriate point.

5.3.3.2.6 Vertical diffusion

These terms must be discretized implicitly as the restriction imposed by an explicit discretization on the time step is strict for the resolution we will use.

$$-\sum_{m=1}^{N_{faces}} \vec{F}_{m} \cdot \vec{n} A_{m} = (F_{ijk-1/2}^{t+1} - F_{ijk+1/2}^{t+1})A_{h_{ij-1/2}}^{t}) +$$
Eq. 5-18

with fluxes given by the equation:

$$F_{ijk-1/2}^{t+1} = v_{ij-1/2k-1}^{t} \frac{U_{ijk}^{t+1} - U_{ijk-1}^{t+1}}{DUZ_{ijk-1}^{t}}$$
Eq. 5-19

5.4 Boundary conditions

5.4.1 Free surface

All advective fluxes across the surface are assumed to be null. This condition is imposed by assuming that the vertical flux of *W* at the surface is null:

$$W flux \Big|_{surface} = 0$$
 Eq. 5-20

Diffusive flux of momentum is imposed explicitly by means of a wind surface stress, r_w :

$$v \frac{\partial \overline{v_H}}{\partial z} \Big|_{surface} = \vec{\tau} w$$
 Eq. 5-21

Wind stress is calculated according to a quadratic friction law:

$$\vec{\tau w} = C_D \rho_a \vec{W} \left| \vec{W} \right|$$
 Eq. 5-22

where C_D is a drag coefficient that is function of the wind speed, ρ_a is air density and *W* is the wind speed at a height of 10 m over the sea surface.

5.4.2 Bottom boundary

Also at the bottom, advective fluxes are imposed as null and diffusive flux of momentum is estimated by means of a bottom stress that is calculated by a non-slip method with a quadratic law that depends on the near-bottom velocity. So, the diffusive term at the bottom is written as:

$$v \frac{\overrightarrow{\partial v_H}}{\partial z}\Big|_{bottom} = C_D \overrightarrow{v_H} \Big|_{v_H}$$
Eq. 5-23

 C_D is the bottom drag coefficient that is calculated with the expression:

$$C_{D} = \left(\frac{\kappa}{\log\left(\frac{z+z_{0}^{b}}{z_{0}^{b}}\right)}\right)^{2}$$
Eq. 5-24

where κ is von Karman constant and z_0^{b} is the bottom roughness length. This quadratic law is derived from the logarithmic law of the wall near boundaries characteristic of boundary layers, as the bottom velocities are located half a grid box above the bottom. This term is calculated semiimplicitly following Backhaus [1985] for the sake of numerical stability. No fluxes of salinity and temperature are considered at the bottom.

5.4.3 Lateral closed boundaries

At these boundaries, the domain is limited by land. For the resolution we are using, this lateral boundary layer is resolved, so a impermeable, free slip condition can be used:

$$\frac{\partial \vec{v}_{H}}{\partial \eta} = 0$$

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = 0$$
Eq. 5-25
Eq. 5-26

In the finite volume formalism, these conditions are implemented straightforwardly by specifying zero normal water fluxes and zero momentum diffusive fluxes at the cell faces in contact with land.

5.4.4 Open boundaries

Open boundaries arise from the necessity of confining the domain to the region of study. The values of the variables must be introduced there such that it is guaranteed that information about what is happening outside the domain will enter the domain in a way that the solution inside the domain is not corrupted. Also, waves generated inside the domain should be allowed to go out. There exists no perfect open boundary condition and the most suitable would depend on the domain and the phenomena to be modeled. A recent review paper comparing open boundary conditions in test cases can be found in Palma and Matano [1999]. Some different open boundaries are already introduced in MOHID 3D (Santos, [1995], Montero, [1999]) and some others like FRS (Flow Relaxation Scheme) are in progress.

5.4.5 Moving boundaries

Moving boundaries are closed boundaries that change position in time. If there are inter tidal zones in the domain, some points can be alternatively covered or uncovered depending on tidal elevation. A stable algorithm is required for modeling these zones and their effect on hydrodynamics of
estuaries. A detailed exposition of the algorithms used in MOHID can be found in Martins et al. [1999] and Martins [1999].

6 The Lagrangian Module

6.1 Introduction

Lagrangian transport models are very useful to simulate localized processes with sharp gradients (submarine outfalls, sediment erosion due to dredging works, hydrodynamic calibration, oil dispersion, etc.).

Mohid's Lagrangian module uses the concept of tracer. The most important property of a tracer is its position (x,y,z). For a physicist a tracer can be a water mass, for a geologist it can be a sediment particle or a group of sediment particles and for a chemist it can be a molecule or a group of molecules. A biologist can spot phytoplankton cells in a tracer (at the bottom of the food chain) as well as a shark (at the top of the food chain), which means that a model of this kind can simulate a wide spectrum of processes.

The movement of the tracers can be influenced by the velocity field from the hydrodynamic module, by the wind from the surface module, by the spreading velocity from oil dispersion module and by random velocity.

At the present stage the model is able to simulate oil dispersion, water quality evolution and sediment transport. To simulate oil dispersion the lagrangian module interacts with the oil dispersion module, to simulate the water quality evolution the lagrangian module uses the feature of the water quality module. Sediment transport can be associated directly to the tracers using the concept of settling velocity.

Figure 6-1 represents the information flux between the lagrangian module and other modules of *Mohid*.



Figure 6-1: Information flux between the Lagrangian module and other modules

Another feature of the lagrangian transport model is the ability to calculate residence times. This can be very useful when studying the exchange of water masses in bays or estuaries.

6.2 Tracer concept

Like referred above, the *Mohid's* Lagrangian module uses the concept of tracer. The tracers are characterized by there spatial coordinates, volume and a list of properties (each with a given concentration). The properties can be the same one like the ones described in the water properties module or coliform bacteria. Each tracer has associated a time to perform the random movement.

The tracers are "born" at origins. Tracers which belong to the same origin have the same list of properties and use the same parameters for random walk, coliform decay, etc. Origins can differ in the way they emit tracers. There are three different ways to define origins in space:

- a "Point Origins" emits tracers at a given point;
- a "Box Origins" emits tracers over a given area;
- a "Accident Origins" emit tracers in a circular form around a point;

There are two different ways in which origins can emit tracers in time:

- a "Continuous Origins" emits tracers during a period of time;
- a "Instantaneous Origins" emits tracers at one instant;

Origins can be grouped together in Groups. Origins which belong to the same group are grouped together in the output file, so it is more easy to analyze the results.

6.3 Equations

6.3.1 Tracer Movement

The major factor responsible for particle movement is generally the mean velocity. The spatial co-ordinates are given by the definition of velocity:

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i(x_i, t)$$
 Eq. 6-1

where *u* stands for the mean velocity and *x* for the particle position.

Equation 3.1 is solved using a simple explicit method:

$$x_i^{t+\Delta t} = x_i^t + \Delta t \cdot u_i^t$$
 Eq. 6-2

Higher order accuracy requires the use of an iterative procedure. The scheme adopted by Monteiro (1995) uses second order accuracy. Costa (1991) concluded that higher order schemes are important whenever curvature of the flow exists and a large time step is used. For most of the

natural flows the explicit method is accurate enough. Velocity at any point of space is calculated using a linear interpolation between the points of the hydrodynamic model grid. The lagrangian module permits to divide the calculation of the trajectory of the tracers into sub-steps of the hydrodynamic time step.

6.3.2 Turbulent Diffusion

Turbulent transport is responsible for dispersion. The effect of eddies over particles depends on the ratio between eddies and particle size. Eddies bigger than the particles make them move at random as explained in Figure 6-2. Eddies smaller than the particles cause entrainment of matter into the particle, increasing its volume and its mass according to the environment concentration, like shown in Figure 6-3.



Figure 6-2: Random movement forced by an eddy larger than the particle



Figure 6-3: Random movement forced by an eddy larger than the particle

The random movement is calculated following the procedure of Allen (1982). The random displacement is calculated using the mixing length and the standard deviation of the turbulent velocity component, as given by the turbulence closure of the hydrodynamic model. Particles retain that velocity during the necessary time to perform the random movement, which is dependent on the local turbulent mixing length.

The increase in volume is associated with small-scale turbulence and is reasonable to assume it as isotropic. In these conditions, small particles keep their initial form and their increase in volume is a function of the volume itself.

6.3.3 Mass Decay rate

The decay rate of coliform bacteria, which are can associated to the tracers, is computed by the following equation:

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\ln 10}{T_{90}}C$$
 Eq. 6-3

where C represents the concentration, and T_{90} the time interval for 90% of the coliform bacteria to die.

An implicit method is used to solve Eq. 6-3 numerically, preventing a negative number of coliform bacteria.

6.3.4 Monitoring Boxes

The lagrangian module permits to monitor the distribution of particles inside "monitoring boxes". This feature is very useful to compute the residence time of water inside these monitoring boxes and the origins of the water present inside each box at each moment. The lagrangian module "monitors" the boxes the following way:

 In every instant the volume of each box b, InstBoxVol(b) is calculated;

$$InstBoxVol(b) = \int (h+Z)dxdy$$

 In every instant the origin "o" of the water inside each monitoring box "b" is identified and the volume of the water from each origin is stored in the variable *InstVolumeByOrigin (b, o)*:

InstVolumeByOrigin
$$(b, o) = \sum_{o} Vol_{j}^{b}$$

 In case of instantaneous emissions in boxes, these contributions are integrated over the time, given the integrated contribution over the time, *IntgVolumeByOrigin(b, o)*

$$IntgVolumeByOrigin(b, o) = \int InstVolumeByOrigin(b, o)dt$$

A measure of the residence time of the water emitted into box "o" in monitoring box "b" is given by:

$$Re\ sidenceTimePerBox(b, o) = IntgVolumeByOrigin(b, o) / IntialVol(o)$$

Adding the values for all monitoring boxes inside the estuary one gets the residence time inside the whole system of the water emitted into box "o":

$$\operatorname{Re} sidenceTime(o) = \sum_{b} \operatorname{Re} sidenceTimePerBox(b, o)$$

These values also permit to compute how each monitoring box is influenced by each emitting box:

$$InfluenceOverBox(b, o) = IntgVolumeByOrigin(b, o) / InitialVol(b)$$

In case of a continuous emission, the residence time can be computed as:

Re sidence TimePerBox(b, o) = InstVolumeByOrigin(b, o) / Discharg eRate(o)

Again, the addition of the values of the residence time in each box gives the Residence time inside the System

- The Output is done in four ways:
 - Time Series in ASCII columns for every monitoring box and every time step. For every monitoring box a file is written where the first column represents the box volume and others represent the contributions to this box from every origin. Both, the instantaneous and the integrated values are written
 - o Time Series in ASCII of the variable

ResidencetimeperBox(b,o)

 HDF Matrix for every Origin, every output instant. The relative contribution of each emitting box "o" for the instantaneous volume in each monitoring box "b" is written as the percentage of the instantaneous volume of the monitoring box:

Matrix(b,o) = 100 * InstVolumeByOrigin(b,o) / InstBoxVol(b)

HDF Matrix, one for all origins, every output time. The output Matrix is filled depending on the instantaneous contributions (in volume) of particle to a given monitor box. The missing volume is filled with 0 (freshwater).

7 The Oil Module

7.1 Introduction

The prediction and simulation of the trajectory and weathering of oil spills are essential to the development of pollution response and contingency plans, as well as to the evaluation of environmental impact assessments.

In order to predict the behaviour of the oil products spilled in coastal zones, an oil weathering model was developed, which predicts the evolution and behaviour of the processes (transport, spreading and behaviour) and properties of the oil product spilled in water. Some pollution response methods are also integrated in the model.

7.2 Implementation

Oil density and viscosity, and many different processes are included in oil module, such as oil spreading, evaporation, dispersion, sedimentation, dissolution, emulsification, oil beaching and removal techniques.

Different alternative methods were coded for the prediction of some processes like oil spreading, evaporation, dispersion, sedimentation and emulsification. Therefore, when using the model, there is more than one way of simulating the same process, depending, for example, on the characteristics of the computational mesh or on the magnitude of the spill.

The oil weathering module (OWM) uses mainly the 3D hydrodynamics and 3D lagrangian transport modules. The hydrodynamic module simulates the velocity field necessary for the lagrangian module to calculate oil trajectories. These oil trajectories are computed assuming that oil can be idealized as a large number of particles that independently move in water. Water properties and atmospheric conditions are introduced in lagrangian module and used by oil module for determination of oil processes and properties. Excepting spreading and oil-beaching, all weathering processes and properties are assumed uniform for all tracers, like water properties and atmospheric conditions, which are considered equal to these environmental conditions determined in accident origin.

As it was already mentioned, the movement of the oil tracers can be influenced by the velocity field from the hydrodynamic module, by the wind from the surface module, by the spreading velocity from oil module and by random velocity.

Oil temperature is assumed equal to water temperature, neglecting solar radiation or any other energy transfer process that may influence oil temperature.





7.3 Equations

7.3.1 Spreading

In case of an instant accident, the initial area of spilled oil is determinated by an equation deduced from Fay's solutions (Fay, 1969). Once initial phase of spreading (gravity-inertial phase) is too short, initial area is calculated when that phase ends, and gravity-viscous phase starts:

$$A_0 = \pi \frac{k_2^4}{k_1^2} \left(\frac{\Delta g V_0^5}{v_w} \right)^{1/6}$$
 Eq. 7-1

Where:

A₀ – initial area

 $\Delta = (\rho_{w} - \rho_o) / \rho_w$

 ρ_{W} water density

 ρ_{o} - oil density

g – gravity acceleration

 V_0 – volume of spilled oil

 v_w - water kinematic viscosity

 $k_1 = 0.57$ and $k_2 = 0.725$ (as recommended by Flores et al 1999)

Two different algorithms were implemented to estimate oil spreading.

One of the algorithms determines random velocities $u_d \in v_d$ (with uniform distribution) inside range $[-U_r, U_r]$, $[-V_r, V_r]$ (in directions *x* and *y*, respectively) proportional to diffusion coefficients, which are calculated assuming that lagrangian tracers spreading is equivalent to Fay's formulas solution (Fay, 1969). The following relationship between diffusion coefficients D_x and D_y and the velocity fluctuation range $[-U_r, U_r]$, $[-V_r, V_r]$ is adopted according to Leitão (1996):

$$U_{r} = \sqrt{\frac{2D_{x}}{\Delta t}}$$
Eq. 7-2
$$V_{r} = \sqrt{\frac{2D_{y}}{\Delta t}}$$
Eq. 7-3

Random velocities are therefore determined in the following way, like suggested by Proctor *et al.*(1994):

$$v_d = R_1 sen(2\pi R_2) \cdot V_r \qquad \qquad \text{Eq. 7-5}$$

where $R_1 \in R_2$ are randomly generated numbers between 0 and 1.

The only phase simulated in spreading is the gravity-viscous phase, from solutions proposed by Fay, where diffusion coefficients D_x and D_y have the following formulation(this model uses a numerical solution of this equation):

$$D_x = D_y = \frac{\pi k_2^2}{16} \left(\frac{\Delta g V^2}{v_w^{1/2}} \right)^{1/3} \cdot \frac{1}{\sqrt{t}}$$
 Eq. 7-6

Where:

V- volume of spilled oil

t – time after spill

The other algorithm proposed for oil spreading is based in thickness differences inside oil slick, presuming that the existence of a thickness gradient generates a "spreading force" in the direction of minor thickness. Therefore, a tracer will move from the computational cell with larger oil thickness to the one thinner.

This formulation uses a coefficient to approach the solution to the Fay solution, in order to make results sensible to some factors, like different oil densities, originating different behaviours.

Spreading coefficient is given by:

$$k = k_1 \cdot \frac{\Delta^{1.6} g V^2}{v_w^{1/6}}$$
 Eq. 7-7

where k_1 is a parameter introduced by the user, with a default value of 10.0.

Therefore, in oil module velocities are calculated in the faces of cells where oil is present, in directions x and y, in the following way:

$$u_{cell} = k \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x}$$
 Eq. 7-8

$$v_{cell} = k \cdot \frac{\Delta h}{\Delta y}$$
 Eq. 7-9

$$\Delta h = \Delta h$$

where Δx and Δy are the thickness gradients of a cell, in directions *x* and *y*. Subsequently, in lagrangian module tracers velocities are interpolated based on cell faces velocities and tracers position.

If average oil thickness becomes too thin – less than a value between 0.1 and 0.01 mm, depending of product viscosity –, oil spreading is stopped, according to Reed (1989).

7.3.2 Density

Density can be estimated by:

$$\rho_e = F_{wv} \cdot \rho_w + \rho_{oil} (1 - F_{wv}) (1 + c_{DE} F_e) [1 - c_{DT} (T - T_0)]$$
 Eq. 7-10

where ρ_e is the density of the emulsion at temperature *T*, ρ_{oll} is the density of fresh oil at reference temperature T_0 , ρ_w is the water density, $c_{DE} = c_{DT}$ are empirical constants (NOAA (1994) recommends the following values: $c_{DE} = 0.18$ and $c_{DT} = 8 \times 10^{-4}$).

The oil initial density is obtained from API density. Only oil products with lower density than water are modelled, because the remainder will sink.

7.3.3 Viscosity

Viscosity is changed by three major processes: temperature, evaporation and emulsification.

The influence of temperature can be calculated by Andrade's correlation:

$$\mu = \mu_0 e^{c_T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)}$$
 Eq. 7-11

where μ is the oil viscosity at temperature *T*, μ_0 is the initial oil viscosity at reference temperature T_0 and c_T is an empirical constant whose recommended value by NOAA (1994) is 5000 K.

Viscosity modification due to emulsification is defined by Mooney's equation (1951):

$$\mu = \mu_0 e^{\left[\frac{c_V F_{WV}}{(1 - c_M F_{WV})}\right]}$$
Eq. 7-12

where F_{wv} is water volume fraction the emulsion, c_V is an adimensional empirical constant (Mackay et al., 1980 recommends the value of 2.5) and c_M is an additional Mooney's constant with the value of 0.65.

The effect of evaporation on viscosity is calculated by the following equation (Mackay et al., 1980):

 F_{em} is the mass fraction of evaporated oil, and the adimensional empirical constant c_E varies with oil type, between 1 and 10, with higher values for more viscous products. In this model, when fresh oils at 15°C have a cinematic viscosity greater than 38 cSt, c_E is always considered 10. In case of less viscous oils, c_E is estimated by a second degree polynomial regression:

$$c_E = -0.0059 \cdot V_{cin15}^2 + 0.4461 \cdot V_{cin15} + 1.413$$
 Eq. 7-14

where V_{cin15} is the oil cinematic viscosity at 15°C.

The three previous equations (Eq. 7-11, Eq. 7-12 and Eq. 7-13) can be joined in a single equation:

$$\mu = \mu_0 \cdot e^{\left[(c_E F_{em}) + \frac{c_V F_{wv}}{(1 - c_M F_{wv})} + c_T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]}$$
Eq. 7-15

7.3.4 Evaporation

In MOHID, the oil evaporation process can be estimated by two different methods: an analytical method, also known as the evaporative exposure method (developed by Stiver & Mackay, 1984), and by a more recent methodology proposed by Fingas (1998).

Evaporative exposure method is given by the formula:

$$\frac{dF_e}{dt} = \frac{K_e A_s}{V_0} \cdot \exp\left(A - \frac{B}{T} \left(T_0 + T_G F_e\right)\right)$$
 Eq. 7-16

 F_e is the volume fraction of evaporated oil, T is oil temperature, A_s is the oil slick area, V_0 is the initial oil volume, K_e is the mass transfer coefficient, determined by a simple formulation proposed by Buchanan & Hurford (1988):

$$K_e = 2.5 \times 10^{-3} W^{0.78}$$
 Eq. 7-17

A and *B* are empirical constants, T_o is the initial boiling point and T_G is the distillation curve gradient. All these parameters depend of oil type. In this model, they are estimated, and T_o e T_G are obtained from *API* density, according to version 1.1 of ADIOS model (NOAA, 1994):

For crude oils:

$$T_0 = 532.98 - 3.1295 \cdot API$$
 Eq. 7-18

$$T_G = 985.62 - 13.597 \cdot API$$
 Eq. 7-19

For refined products:

$$T_0 = 654.45 - 4.6588 \cdot API$$
 Eq. 7-20

$$T_G = 388.19 - 3.8725 \cdot API$$
 Eq. 7-21

Mervin Fingas proposed other method for evaporation calculus. He proposed a simplified formulation, where the relevant factors are time and temperature.

For many oil types, Fingas determined specific empirical equations in the following forms (this model uses the numerical solutions of the following equations):

%
$$Ev = (\alpha + \beta \cdot T) \ln(t)$$
 Eq. 7-22
or

$$\&Ev = (\alpha + \beta \cdot T)\sqrt{t}$$
 Eq. 7-23

where %*Ev* is the percentage (by weight) of evaporated oil, α and β are empirical constants specific for each oil type, *T* is oil temperature, *t* is time after spill (minutes).

If empirical data is unknown, generically equations can be used:

$$\&Ev = [(0.165(\&D) + 0.045 \cdot (T - 15)]\ln(t)]$$
 Eq. 7-24

or

$$\&Ev = [(0.0254(\&D) + 0.01 \cdot (T - 15)]\sqrt{t}$$
 Eq. 7-25

%D is the percentage (by weight) distilled at 180°C.

Square root equations are used in some refined oils and in short term simulations (1-2 days).

7.3.5 Emulsification

This process consists in incorporation of water in oil. This process usually starts after an amount of oil has evaporated. An emulsification constant is used, which means the percentage of oil evaporated before emulsification starts. By default, this constant is 0%.

When emulsification starts, incorporation of water in oil can be simulated by two different processes.

An equation widely used, proposed by Mackay *et al.* (1980), is implemented in this model:

$$\frac{dF_{wv}}{dt} = K_w (1+W)^2 \left(1 - \frac{F_{wv}}{F_{wv}^{final}}\right)$$
 Eq. 7-26

where F_{wv} is the water volume fraction incorporated in emulsion; F_{wv}^{final} is the final volume fraction of water incorporated in emulsion; K_w is an empirical constant, introduced by the model user. Usually this constant assume values between 1.0×10^{-6} and 2.0×10^{-6} . MOHID default value is 1.6×10^{-6} , which is also used in ADIOS model (NOAA, 1994).

The other algorithm used is Rasmussen equation (Rasmussen, 1985).

$$\frac{dF_{wv}}{dt} = R_1 - R_2$$
 Eq. 7-27

where:

 R_1 - water incoming rate (s⁻¹), given by:

$$R_{1} = \frac{K_{1}}{\mu_{0}} (1 + W)^{2} (F_{wv}^{final} - F_{wv})$$
 Eq. 7-28

 R_2 - water outgoing rate (s⁻¹), given by:

$$R_2 = \frac{K_2}{Asph \cdot Wax \cdot \mu_0} F_{wv}$$
 Eq. 7-29

Asph is the asphaltene content in oil (%), *Wax* is the wax content (%), and $K_1 \in K_2$ are experimentally determined constants by Rasmussen (1985):

 $K_1 = 5 \times 10^{-7} \text{ kg.m}^{-3}$; $K_2 = 1.2 \times 10^{-7} \text{ kg.m}^{-1} \text{.s}^{-2}$.

7.3.6 Dispersion

This is the process where oil droplets entrain in water column.

Two different methods are available to predict this weathering process. One of them is Delvigne & Sweeney (1988) method:

$$\frac{dm_d}{dt} = c_{oil} \cdot D_{ba}^{0.57} \cdot f_s \cdot F_{wc} \cdot d_0^{0.7} \cdot \Delta d \qquad \qquad \text{Eq. 7-30}$$

This equation estimates mass transfer rate per time unit, where f_s is the surface fraction covered by oil (considered equal to oil content in emulsion water + oil); d_0 is the droplet diameter; Δd is the oil droplets diameters range around d_0 (model assumes a droplet size range between 5 – 70 microns. Bigger droplets will tend to resurface - NOAA, 1994); c_{oil} is a parameter experimentally determined which depends on oil type. This model uses a logarithmical regression based on oil cinematic viscosity:

$$c_{oil} = -312.25 \cdot \ln(V_{cin}) + 2509.8$$
 Eq. 7-31

where V_{cin} is the oil cinematic viscosity

(if this regression gives negative values, c_{oil} is considered 0)

 D_{ba} is the wave dissipation energy per unit of surface area, which can be calculated by:

$$D_{ba} = 0.0034 \rho_w g H_{rms}^2$$
 Eq. 7-32

H_{rms} is:

$$H_{rms} = \frac{1}{\sqrt{2}} H_0$$
 Eq. 7-33

where H_0 is wave height.

 F_{wc} is the fraction of the sea surface that is covered with whitecaps per time unit, given by:

$$F_{wc} = \frac{C_b (W - W_i)}{T_w}$$
 Eq. 7-34

where $C_b = 0,032 \text{ s.m}^{-1}$, W_i is the wind velocity to start whitecaps (4 m.s⁻¹); T_w is the wave period.

If wave period and wave height are unknown, these properties can be

empirically determined as function of wind speed, according to ADIOS model formulations (NOAA, 1994):

$$H_0 = 0.243 \frac{W^2}{g}$$
 Eq. 7-35

and

$$T_w = 8.13 \frac{W}{g}$$
 Eq. 7-36

Once turbulent energy is difficult to determine, other simplified algorithms have been developed for vertical dispersion in function of square wind velocity. One of them is used in this model – the formulation proposed by Mackay *et al.* (1980):

$$\frac{dm_d}{dt} = 0.11m_{oil}\frac{(1+W)^2}{1+50\mu^{1/2}h\sigma}$$
 (kg.h⁻¹) Eq. 7-37

, where m_{oil} is the oil mass that remains in surface, μ is the oil dynamic viscosity (cP), *h* is the slick thickness (cm), *W* is the wind velocity(m.s¹) and σ is oil-water interfacial tension (dyne.cm⁻¹).

7.3.7 Sedimentation

Although oil sedimentation process is relatively complicated and difficult to estimate, a formulation developed by Science Applications International (Payne *et al.*, 1987) is used in MOHID:

$$\frac{dm_{sed}}{dt} = 1.3 \sqrt{\frac{E}{V_w}} K_a \cdot C_{oil} \cdot C_{sed} \cdot z_i \cdot A_s$$
 Eq. 7-38

This equation gives the mass of sedimented oil per time unit (kg.s⁻¹), where:

Vw is the water dynamic viscosity (kg.m⁻¹.s⁻¹); Ka is the stick parameter with value 1×10^{-4} m³.kg⁻¹; z_i is the intrusion depth of oil droplets in the water column due to breaking waves, given by Delvigne & Sweeney (1988):

$$z_i = 1.5 \cdot H_0$$
 Eq. 7-39

E is the rate of dissipated energy from water surface (J.m⁻³.s-1). This is estimated from the wave dissipation energy (D_{ba}), previously explained in dispersion section:

$$E = \frac{D_{ba}}{z_i \cdot T_w}$$
 Eq. 7-40

 C_{sed} is the sediment concentration in water column (kg.m⁻³), C_{oil} is the oil droplet concentration in water column (kg.m⁻³). This concentration can be determined from dispersion rate proposed by Delvigne & Sweeney (1988) (explained in dispersion section), integrating this rate for wave period and intrusion depth of oil droplets:

$$\frac{dC_{oil}}{dt} = \frac{\frac{dm_d}{dt}}{z_i}$$
 Eq. 7-41

Only droplets greater than 70 microns and smaller than 200 microns are considered for sedimentation. Bigger droplets are less probable to stick to sedimented particulate matter, and smaller than 70 microns are already estimated in dispersion process.

7.3.8 Dissolution

This process may be quantified through Cohen method, where dissolution rate is estimated by:

$$\frac{dDiss}{dt} = K \cdot f_s \cdot A_s \cdot S \qquad (g.h^{-1})$$
 Eq. 7-42

 f_s is the surface fraction covered by oil (considered equal to oil content in emulsion water + oil); A_s is the oil slick area (m²) and *S* is the oil solubility in water. Huang & Monastero (1982) proposed an analytical solution for the solubility of a typical oil (this model uses the numerical solutions of the following equation):

where S_0 s the solubility of the "fresh" oil (30 g.m³); α is a decayment constant (0.1); *t* is the time after spill (h) and *K* is the dissolution mass transfer coefficient (0.01m.h⁻¹)

7.3.9 Oil-Beaching

When oil reaches a coastal zone, it might become beached. This model estimates the amount of beached oil when the model user predefines a beaching probability (or different beaching probabilities for different coastal zones).

7.3.10 Removal techniques

Some removal techniques like chemical dispersion or mechanical cleanup are also included in model.

7.3.10.1 Chemical Dispersion

The application of chemical dispersants is simulated since dispersant efficiency, percentage of oil slick sprayed, and application period are known. The chemical dispersed rate is predicted by the following equation:

$$\frac{dm_{Qchem}}{dt} = \frac{m_{oil} \cdot \left(\frac{\% A_{spr}}{100}\right) \cdot \left(\frac{\% Ef}{100}\right)}{\Delta t}$$
Eq. 7-44

 m_{oil} is the instant mass of oil $\%A_{spr}$ is the percentage of total slick area sprayed by the chemical dispersant, and %Ef is the efficiency of the chemical product.

7.3.10.2 Mechanical Cleanup

Mechanical Cleanup is also simulated for a certain time period, where the volume rate or total emulsion removed during that period must be known.

If emulsion volume rate removed by the skimmer is unknown, it is obtained from the total volume of emulsion mechanically removed in the operation time period:

$$\frac{dV_{mec}}{dt} = \frac{\frac{V_{TotMec}}{1000}}{\Delta t}$$
Eq. 7-45

Where V_{TotMec} is the total volume of emulsion mechanically removed (m³/h) and $\frac{dV_{mec}}{dt}$ is the volume rate of emulsion mechanically removed (l/h).

After a conversion of this emulsion volume rate to m^3/s , the rate of oil volume removed is estimated by:

$$\frac{dV_{OilMec}}{dt} = \frac{dV_{mec}}{dt} \cdot (1 - Y)$$
 Eq. 7-46

Where Y is the water content in emulsion water + oil.

8 The Water Properties Module

8.1 Introduction

The water properties module coordinates the evolution of the water properties in the water column, using a eulerian approach. This coordination includes the transport due advective and diffuse fluxes, water discharges from rivers or anthropogenic sources, exchange with the bottom (sediment fluxes) and the surface (heat fluxes and oxygen fluxes), sedimentation of particulated matter and the internal sinks and sources (water quality).

Actually the model *Mohid* can simulate 24 different water properties: temperature, salinity, phytoplankton, zooplankton, particulate organic phosphorus, refractory dissolved organic phosphorus, non-refractory dissolved organic phosphorus, inorganic phosphorus, particulate organic nitrogen, refractory organic nitrogen, non-refractory organic nitrogen, ammonia, nitrate, nitrite, biological oxygen demand, oxygen, cohesive sediments, ciliate bacteria, particulate arsenic, dissolved arsenic, larvae and fecal coli-forms. Any new property can be added very easily, due to the object orientated programming used within the *Mohid* model.

In the water quality module, the nitrogen, oxygen and phosphorus cycle can simulate the terms of sink and sources. Figure 8-1 represents the information flux of the water properties module.



Figure 8-1: Information flux between the Water Properties Module and other modules

8.2 Equations

8.2.1 Transport

The transport due advective and diffusive fluxes, of a given property *A*, is resolved by the following equation:

$$\partial_t A = -\partial_x (uA) - \partial_y (vA) - \partial_z (wA)$$

+ $\partial_x (v'_H \partial_x A) + \partial_y (v'_H \partial_y A) + \partial_z ((v'_t + v'_A) \partial_z A)$ Eq. 8-1

where u, v and w are the velocity in x, z and z direction, v'_{H} and v'_{t} the horizontal and vertical eddy diffusivities, and v'_{A} the molecular diffusivity.

The temporal evolution of A is the balance of advective transport by the mean flow and turbulent mixing and the possible sink and sources the property may have.

8.2.2 Density

The density ρ is calculated as a function of temperature and salinity by a simplified equation of state (*Leendertsee and Liu*, [1978]):

$$\rho = (5890 + 38T - 0.375T^2 + 3S)/$$

 $((1779.5+11.25T-0.0745T^2) - (3.8+0.01T)S +$

$$0.698(5890 + 38T - 0.375T^2 + 3S))$$
 Eq. 8-2

That is an approximation for shallow water of the most widely used UNESCO equation (UNESCO, [1981]).

9 The Water Quality Module

9.1 Introduction

Today, efforts towards ecological modeling are being made in most countries were water quality management is a major concern. Fransz *et al.*, (1991) notice that most new generation models tend to become much more biologically and chemically diversified than earlier models, as it is now largely recognized that there is no way to simulate in sufficient detail the ecosystem behavior without an in-depth treatment of the full cycle of organic matter.

These processes are not foreign to the preoccupations caused by the eutrophication and its various manifestations. Although there is general consensus that the inputs of nutrients to the sea must be reduced there is so far no firm scientific basis to decide upon the extent of such reductions.

An appropriate way of addressing the problem of eutrophication and of testing nutrient reduction scenarios is to simulate the phenomenon with mathematical models. It is probably correct to assume that any ecological model with a sufficiently complex internal structure and the multiple relationships that are found at the lower trophic levels will come close to an answer, provided the right time scale is applied.

The ecological model included in *Mohid* is adapted from EPA, (1985) and pertain to the category of ecosystem simulations models i.e. sets of conservation equations describing as adequately as possible the working and the interrelationships of real ecosystem components. It's not correct to say that the model describes the lower trophic levels with great accuracy. In fact the microbial loop that plays a determinant role in water systems in the recycling processes of organic waste is very simplified in our model.

Lower trophic levels appear in nearly all marine ecosystem simulation models since there is at least a compartment "phytoplankton" required to drive the organic matter cycle. Some early models applied in the North Sea were one-compartment models, especially endeavouring to simulate phytoplankton growth, in relation with the physical environment and with grazing pressure (treated as a forcing variable). Both the influence of the Lotka-Volterra equations – developed in the 1920s – and that of findings in the field of plant physiology (photosynthesis-light relationship) were discernible. It was not long before limiting nutrient and herbivorous zooplankton were incorporated as well, as state variables in simulation models. (Fransz *et al.*, 1991)

9.2 The general model

Franz *et al.* (1991) defined the general conservation equations for an idealized marine ecosystem model. Here we have adapted their definitions and establish a system that consists in five general state variables including phytoplankton, zooplankton, dissolved nutrient, organic matter in pelagic phase, organic matter in benthic phase, pelagic bacteria, benthic bacteria.

dN/dt =	- f_{12} (uptake by phytoplankton) - f_{15} (uptake by pelagic bacteria) + f_{51} (pelagic mineralization) + f_{61} (benthic mineralization) + f_{01} (excretion by zooplankton) + advection and diffusion
dP/dt =	+f ₁₂ (phytoplankton growth)) – f ₂₃ (excretion of pOM) – (\dot{f}_{23} + \dot{f}_{24}) (natural mortality) – f ₂₀ (grazing) – f ₂₄ (phytoplankton sinking) + advection and diffusion.
dZ/dt =	+ f_{20} (zooplankton growth) – f_{01} (excretion of nutrients) – f_{04} (excretion of bOM) - f_{03} (excretion of pOM)
dpOM/dt =	+f ₂₃ (excretion of pOM) + f_{23} ((1-a).natural mortality of phytoplankton) + f ₅₃ ((1-b).natural mortality of pelagic bacteria) + f ₀₃ ((1-c).feacal pellets and detritus from upper trophic levels) – f ₃₅ (pOM degradation by pelagic bacteria) + advection and diffusion.
dbOM/dt =	+f' ₂₄ ((a).natural mortality of phytoplankton) + f ₂₄ (phytoplankton sinking) +f ₅₄ ((b). natural mortality of pelagic bacteria) + f ₆₄ (natural mortality of benthic bacteria) + f ₀₄ ((c).feacal pellets and detritus from upper trophic levels) - f ₄₆ (bOM degradation by benthic bacteria) + advection and diffusion.

 $dpB/dt = +f_{35} (pOM \ degradation) + f_{15} (N \ uptake) - f_{51} (pelagic \ mineralization) - (f_{53} + f_{54}) (natural \ mortality) + advection \ and \ diffusion.$

dpB/dt = $+f_{46}$ (bOM degradation) - f_{61} (benthic mineralization) - f_{64} (natural mortality).

where *N* represents the concentration of dissolved inorganic nutrient, *P* the concentration of concentration of phytoplankton, *Z* the concentration of zooplankton, *pOM* the concentration of pelagic organic matter, *bOM* the concentration of benthic organic matter, *pB* the concentration of pelagic bacteria, *bB* the concentration of benthic bacteria and *a*, *b*, *c* factors comprised between 0 and 1.

The primary production process, powered by light energy, is the necessary engine for all transfers of mass between biological compartments. Zooplankton that on early days was not explicitly modeled it's now considered an important state variable.

The *Mohid* Water Quality module is a zero-dimensional ecological model, which can be used by the eulerian or the lagrangian transport modules. The nitrogen cycle, oxygen cycle and the phosphorus cycle are included. A brief description of these cycles is presented in the next sections. Figure 9-1 represents the information flux between the water quality module and other modules.



Figure 9-1: Information flux between the water quality module and other modules

The water quality module has been developed in terms of sinks and sources. Such an approach is convenient to give these models the desired flexibility. Because of the properties interdependency a linear equation system is computed for each control volume and this system can be compute forward or backward in time.

Many of the equations described in the next sections are written as dependent on a regulating factor, which contains the functional response of the organism to some environmental parameters such as light, nutrients or temperature. When growth is a function of many resources, there is a large range of functional forms that might express the joint dependence. To control the various possibilities, it is common to think of separate resources as limiting factors reducing some theoretical maximum growth rate - factors that can be determined separately and the combined by a small number of ways.

Each growth limitation factor can range from a value of 0 to 1. A value of 1 means the factor does not limit growth (i.e. is at optimum intensity, nutrients are available in excess, etc) and a value of 0 means the factor is so severely limiting that growth is inhibit entirely.

Four major approaches have been used to combine the limiting factors:

- A multiplicative formulation in which all factors are multiplied together. This approach assumes that several nutrients in short supply will more severely limit growth than a single nutrient in short supply. The major criticism of this approach is that the computed growth rates may be excessively low when several nutrients are limiting. Also, the severity of the reduction increases with the number of limiting nutrients considered in the model, making comparison between models difficult.
- A minimum formulation in which the most severely limiting factor alone is assumed to limit growth. This formulation is based on "Liebig's law of the minimum" which states that the factor in shortest supply will control the growth of algae. The minimum formulation is often used only for nutrient limitation, with a multiplicative formulation for the light limitation factor.

• A harmonic mean formulation that combines the reciprocal of each limiting factor in the following manner:



where n = number of limiting factors.

This formulation is based on an electronic analogy of several resistors in series. The rationale for this formulation is that it includes some interactions between multiple limiting nutrients, but is not as severely limiting as the multiplicative formulation. Under a wide range of conditions, the harmonic mean formulation and minimum formulation produce similar growth response curves (Swartzman and Bentley, 1979 in EPA, 1985).

 An arithmetic mean formulation that uses the average of each limiting factor. The rationale for this formulation is the same as for the harmonic mean formulation. However, this formulation is rarely used since it does not restrict growth enough. For example, the arithmetic mean formulation allows growth even if a critical nutrient such nitrogen is totally absent, as long other nutrients are available.

9.3 Phytoplankton

The growth of phytoplankton is limited to several factors, like described in the following sections.

9.3.1 Nutrient limitation

The model considers nitrogen (ammonia and nitrate) and phosphorus to be the nutrients that limits phytoplankton growth. Nitrate and ammonia are considered in the same pool. But difficulties could be encountered to subtract phytoplankton uptake from the ammonia and nitrate pool and this problem is solved by introduction of the ammonia preference factor (β_{NH4}). The nutrient limitation is expressed in a Michaelis-Menten form, with half saturation constant (K_N). In the case of ammonia and nitrate, the model considers:

$$\Psi(N)_{Phy} = \frac{\mathrm{NH}_4 + \mathrm{NO}_3}{K_{\mathrm{N}} + \mathrm{NH}_4 + \mathrm{NO}_3}$$
Eq. 9-2

where $\Psi(N)_{Phy}$ represents the nutrient limitation due nitrogen presence, NH_4 and NO_3 the ammonia and nitrate concentrations (mg N.L⁻¹) and Kn the half-saturation constant for nitrogen limitation (mg N.L⁻¹).

In the case of phosphorus the above equation takes the form:

$$\Psi(P)_{Phy} = \frac{PO_4}{K_P + PO_4}$$
 Eq. 9-3

where $\Psi(P)_{Phy}$ represents the nutrient limitation due phosphorus presence, PO₄ the phosphorus concentration (assumed to be completely available as orthophosphate) (mg P.L⁻¹) and *Kp* the half-saturation constant for phosphorus limitation (mg P.L⁻¹).

The nutrient limitation factor is given by the minimum of $\Psi(N)_{Phy}$ and $\Psi(P)_{Phy}$.

9.3.2 Temperature limitation

The concept of Thornton and Lessen, (1978) is adopted to represent temperature limitation factor ($\Psi(T)$) on autotrophy and heterotrophy organisms:

$$\Psi(T) = K_A(T) \cdot K_B(T)$$
 Eq. 9-4

where $K_A(T)$ is defined by:

$$K_{A}(T) = \frac{K_{1} \cdot e^{\gamma_{1} \cdot (T-T\min)}}{1 + K_{1} \cdot (e^{\gamma_{1} \cdot (T-T\min)} - 1)}$$
Eq. 9-5

with

$$\gamma_{1} = \frac{Ln \frac{K_{2}(1 - K_{1})}{K_{1}(1 - K_{2})}}{Topt_{\min} - T\min}$$
 Eq. 9-6

where $K_B(T)$ is defined by:

$$K_B(T) = \frac{K_4 \cdot e^{\gamma_2 \cdot (T \max - T)}}{1 + K_4 \cdot (e^{\gamma_2 \cdot (T \max - T)} - 1)}$$
 Eq. 9-7

with

$$\gamma_{2} = \frac{Ln \frac{K_{3}(1 - K_{4})}{K_{4}(1 - K_{3})}}{T \max - Topt_{\max}}$$
 Eq. 9-8

Topt_{min} (°C) and Topt_{max} (°C) represent the temperature interval for an optimal process, and Tmax (°C) and Tmin (°C) the maximum and minimum tolerable temperature where processes are completely inhibited. Remaining constants (K₁, K₂, K₃ and K4) control the shape of the response curve of temperature effect; these values are assumed equal for all organisms in this model.

9.3.3 Light limitation

Photosynthesis is possible only when light reaching the algae cell is above certain intensity. This means that phytoplankton is limited to the uppermost layers of the water column where light intensity is sufficient for photosynthesis to occur. The depth to which light will penetrate in water, and hence the depth at which production can occur, is dependent on a number of factors; these include absorption of light by water, the wavelength of light, transparency of water, reflection from the surface of the water, reflection from suspended particles, latitude, and season of the year.

The solar radiation depends on factors such as clouds and dust in the atmosphere and the solar elevation. The calculation of the solar radiation is described in the surface module.

When light strikes the surface of water, a certain amount of light is reflected back; the amount depends on the angle at which the light strikes the surface of water. If the angle from the horizontal is low, a large amount will be reflected. Conversely, the nearer the angle is to 90° (that is

perpendicular to the horizontal surface of the water), the greater will be the penetration and the lesser will be the reflection (Nybakken 1993). The angle at which the light strikes the surface of the water is directly related to the maximum height of the sun above the horizon.

The extinction of light in the marine environment is one of the important water quality variables often addressed by aquatic scientists and oceanographers. The characteristics of the underwater light field itself are a classical subject of oceanographic optics (Rivera, 1997). The available light is one of the primary limiting variables in the growth of submerged flora, besides nutrients and temperature. Light availability is of major importance not only in determining how much plant growth will be but also which kind of species will predominate and which kind will evolve (Rivera, 1997). Vertical light attenuation and its spectral distribution are related to the absorption by the water itself and the following additional components of the water column: photosynthetic organisms, suspended particles and soluble compounds. Modeling light attenuation is the basis to predict the intensity and spectral composition of available light for phototropic populations (Vila *et al*, 1996).

The rate of the light reaction of photosynthesis is strictly dependent on light intensity. Increases in light intensity lead to greater photosynthetic rates until some maximum is reached. At this point the producers cannot use any more light. The enzymes involved in photosynthesis cannot act fast enough to process light quanta any faster, so rate of photosynthesis reaches an asymptote. Increasingly higher light intensities usually inhibit photosynthesis (Valiela, 1995).

9.3.3.1 Light extinction in water

Kirk (1980) defines the inherent optical properties as the absorption, scattering and beam attenuation coefficients of a medium. The absorption coefficient is defined as the fraction absorbed per unit of path length from a parallel beam of monochromatic light directed normal to an infinitesimally thin layer of medium. Similarly, the scattering coefficient is defined as the fraction scattered of the incident parallel beam divided by the path length. The beam attenuation coefficient is defined as the sum of the absorption

and scattering coefficients.

By definition, the incident light field or downward irradiance in a water column refers to the instantaneous value of the down-welling radiant flux in a horizontal unit area.

Kirk (1980) differentiates between downward and upward irradiance, the first being that due to down-welling stream of light and the second duo to the upwelling stream of light. In light extinction studies, the desirable quantity is the down-welling PAR which is referred to as the downward irradiance covering the 400 – 700 nm range of the wave spectrum. The down-welling PAR is attenuated due to both scattering and absorption processes by the optically active components in the water column.

The major light absorbing and scattering components in the water column include dissolved organic substances, dead and living plankton material, suspended inanimate particles, and water itself. These components differ in the way they absorb and scatter downward irradiance across the photosynthetic wave band.

Generally, the strong absorption in inland and estuarine waters is attributed to organic substances, gilvin and/or phytoplankton. On the other hand, scattering, as pointed by Kirk (1980), does not itself "remove" light since a scattered photon is still available for photosynthesis. However, by making the photons follow a zig-zag path, the probability of being absorbed by the absorbing components in the aquatic medium is increased. Hence, with the scattering contribution of suspended particles for example, the vertical attenuation is intensified through this mechanism.

A common method often employed in modeling the extinction of downward irradiance is to consider the influence of the major optically active components separately giving partial extinction coefficients for each component. The sum of all the partial extinction coefficients gives the average extinction coefficient of the water column (Rivera, 1997).

Light extinction in natural waters is affected by four primary groups of substances whose composition and concentration differ in each water body giving different values of the extinction coefficient. Further more, the extinction coefficient may change with time due to the varying composition and concentrations of the primary factors. These factors, which are referred to as optically active components of the water column, include inanimate suspended solids, dead or living phytoplankton (algae), gilvin and water itself (Rivera, 1997). Parson *et al.* (1984) uses this concept when defining the extinction coefficient in the water column (k) as follows:

$$k=k_{w}+k_{p}+k_{d}+k_{s} \qquad \qquad Eq. 9-9$$

where k_w , k_p , k_d , and k_s represent diffusion and scattering of light energy due to water (w), phytoplankton (p), suspended particles other than phytoplankton (d), and dissolved matter (s), respectively. The suspended particles include many different forms such as clay particles, organic detritus, and organisms varying in size. Each of these extinction coefficients are highly dependent on wavelength, however according to Parson *et al.* (1984), for the purpose of most biological events, the average extinction coefficient in the wavelength of PAR rather than the value at particular wavelengths is probably the most practical.

The partial extinction coefficients can be determined from the specific extinction coefficient and the concentration of the optically active components of the water column by the relation:

where k_n is the extinction coefficient of a particular component n, κ_n the specific extinction of that component and c_n the observed concentration.

The majority of the water quality models revised (e.g. Vila e Garcia-Gil, 1996 Arhonditsis *et al.* 2000, Napolitano *et al.*, 2000 Nakata *et al.*, 2000, Kawamiya *et al.*, 2000, Humborg *et al.*, 2000, Neuman, 2000, Tett and Wilson, 2000) compute the extinction coefficient considering only phytoplankton self-shading effect. The general form of the established relation is usually like the next equation, with different set of parameters determined according to local measurements.

$$k = k_w + \kappa_{phy} c_{phy}$$
 Eq. 9-11

Cole and Buchak (1995) and Somlyódy and Koncsos (1991) are some examples were the extinction coefficient is computed considering not only the phytoplankton concentration but also sediment concentration.

Each of these specific extinction values can represent a problem of there one in terms of modeling. A usual solution is to develop a relationship based in local measurements that allow us to determine the overall extinction coefficient. This kind of relationship can be dependent on one of the factors already described (usually phytoplankton) but does not specifically distinguish between the chosen factor and other materials. Parson *et al.*, (1984) presents a equation of this kind derived from field observations carried out in the western North Atlantic, which is used by several authors (Yanagi *et al.*, 1997; Miranda 1997). This equation relates the average extinction coefficient (k) to the chlorophyll a concentration (C) for natural phytoplankton community as follows:

$$k = 0.04 + 0.0088C + 0.054C^{2/3}$$
 Eq. 9-12

The coefficients to compute the extinction parameter are determined by the local light conditions of the study area. Portela (1996) following the observations made by Martins e Duffner, (1982) on the Tagus estuary obtained an average value for the extinction coefficient of 4.5 m⁻¹ and a median value of 3.4 m⁻¹. Portela (1996) applied a linear regression model to the observed values of extinction coefficient and the concentration of suspended sediments measured in the Tagus estuary in 1980 (Martins e Duffner, 1982). As expected, a close relation between the two variables is observed. The final regression equation is:

Another formulation included in the Mohid water quality module, which calculates the effect on light attenuation, depending on phytoplankton and sediment concentration, was presented by Pina (2001):

$$k = 0.04 + 0.0088C + 0.054C^{2/3} + 0.036C_{ss}$$
 Eq. 9-14

9.3.3.2 Phytoplankton reaction to light

The rate of the light reaction of photosynthesis is strictly dependent on light
intensity. Increases in light intensity lead to greater photosynthetic rates until some maximum is reached. At this point the producers cannot use any more light, the enzymes involved in photosynthesis cannot act fast enough to process light quanta any faster, so rate of photosynthesis reaches an asymptote. Increasingly higher light intensities usually inhibit photosynthesis (Valiela, 1995).

During the last decades a considerable amount of research has been carried out on primary productivity modeling (e.g. Steele, 1962; Jassby and Platt, 1976; Platt *et al.*, 1980; Falkowski & Wirick, 1981; Eilers and Peeters, 1988). In most of these works formulations of the relationship between primary productivity and light intensity were proposed and tested against field and/or laboratory data. Most of these equations are empirical, only a few of them being deduced from the physiology of photosynthesis (e.g. Fasham and Platt, 1983; Eilers and Peeters, 1988). These formulations have been used for several years in ecological models.

The light intensity affects only the photosynthesis, its representation use the formulation of Steele (1962) integrated on the depth, Parsons *et al..*, (1995) for this zero-dimensional model and a classic Beer-Lambert function for the light intensity:

$$E(z) = E_0 \cdot e^{(-k(p)z)}$$
 Eq. 9-15

with

$$\Psi(E) = \frac{e^1}{k(p).z} \cdot \left(e^{\frac{E_0}{Eopt}e^{(-k(p).z)}} - e^{\frac{E_0}{Eopt}} \right)$$
 Eq. 9-16

 E_0 represents the effective solar radiation at the water surface (W.m⁻²), k(p) the light extinction factor (m⁻¹), E_{opt} the optimal light intensity for photosynthesis and *z* the depth (m).

9.3.4 Equations

Figure 5-1 represents the internal fluxes of phytoplankton modeled by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-2: Internal Flux of Phytoplankton

Phytoplankton is described in terms of carbon concentration (mgC / I). The model assumes three limitations affecting the maximum phytoplankton growth rate, μ max. Temperature $\Psi(T)$, light effect $\Psi(E)$ and nutrient limitation (minimum of $\Psi(N)_{Phy}$ and $\Psi(P)_{Phy}$), like described in the previous chapter.

The simulation of the phytoplankton is developed with the following considerations: it consumes inorganic nutrients (ammonia and nitrate from the nitrogen cycle and inorganic phosphorus from the phosphorus cycle) depending on their availability. Another factor which influences the growth of phytoplankton is the availability of light as a source of energy for photosynthesis. During the process photosynthesis dissolved oxygen is produced. The respiration process consumes oxygen and produces ammonia. The Excretion of Phytoplankton produces dissolved organic material (Refractory Dissolved Organic Nitrogen, Non-Refractory Dissolved Organic Nitrogen, Refractory Dissolved Organic Phosphorus and Non-Refractory Dissolved Organic Phosphorus). By mortality phytoplankton increases the dissolved organic material and the particulate organic material (Particulate Organic Nitrogen and Particulate Organic

Phosphorus). By the grazing of phytoplankton by zooplankton, the concentration of phytoplankton decreases. The settling process is modeled in the water properties module.

The rate equation of phytoplankton, used by Mohid, can be written as:

$$\frac{\partial \Phi_{Phy}}{\partial t} = \left(\mu_{Phy} - r_{Phy} - ex_{Phy} - m_{Phy}\right) \Phi_{Phy} - G$$
 Eq. 9-17

The growth rate, μ_{Phy} (day⁻¹), is given by:

$$\mu_{Phy} = \mu_{\max} \cdot \min(\Psi(N)_{Phy}, \Psi(P)_{Phy}) \cdot \Psi(E)_{Phy} \cdot \Psi(T)_{Phy}$$
 Eq. 9-18

where μ_{max} represents the maximum growth rate.

The respiration, r_{Phy} (day⁻¹), is given by:

$$r_{Phy} = k_{er} \cdot exp(0.069.T^{\circ}) + k_{p} \mu_{Phy}$$
 Eq. 9-19

where k_{er} represents the endogenous respiration constant and k_p the photorespiration factor.

The excretion, e_{Phy} (day⁻¹), is given by:

$$ex_{Phy} = \varepsilon_{Ph}. \ \mu_{Phy} (1 - \Psi(E)_{Phy})$$
 Eq. 9-20

The natural mortality, m_{Phy} (day⁻¹), is given by:

$$m_{Phy} = m_{max} \cdot \frac{\frac{\Phi_{Phy}}{\mu_{Phy}}}{Km + \frac{\Phi_{Phy}}{\mu_{Phy}}}$$
Eq. 9-21

where m_{max} represents the maximum mortality and K_m the mortality half saturation rate.

The grazing, *G*, is given by:

$$G = \frac{g_z}{E} \Phi_Z$$
 Eq. 9-22

	Symbol	Coefficient	Unit	Value
	μmax	Maximal growth Rate	d ⁻¹	0.18
	EPhy	Excretion constant	-	0.07
	<i>k_{er}</i>	Endogenous respiration constant	-	0.0175
	kρ	Photorespiration factor	-	0.125
	K _m	Mortality half saturation rate	mgC.d.L⁻ ¹.	0.3
	m _{max}	Maximal mortality rate	d ⁻¹	0.02
	E	Assimilation efficiency		0.6
Nutrient limita	ation K _N	Half saturation constant for nutrient limitation	mgN.L ⁻¹	0.014
Temperature	limitation			
Topt _{min} Phy		Minimal temperature for an optimal photosynthesis	°C	25.0
	Topt _{max} Phy	Maximal temperature for an optimal photosynthesis	°C	26.5
	Temp _{min} Phy	Minimal temperature for photosynthesis	°C	4.0
	TempmaxPhy Maximal temperature for photosynthesis		°C	37.0
	Eopt	Optimal light intensity for photosynthesis	Wm ⁻²	100
	αPhy	Redfield ratio (N:C)	-	0.18
	<i>K_{PhyNutReg}</i>	phytoplankton nutrient regeneration half saturation rate	mgN.L-1	1.0
	Forg P/Ph	Fraction of organic particulate excretion		0.7
	f _{in/Phy}	Fraction of inorganic excretion	-	0.5
	f _{orgD/Phy}	Fraction of organic soluble excretion	-	0.4

where g_z represents the net growth rate of zooplankton, *E* the assimilation efficiency and Φ_z the concentration of zooplankton.

 Table 9.3-1: Values used in the standard model for the phytoplankton variable

9.4 MacroAlgae



Figure 9-3– Internal flux of MacroAlgae

$\frac{\partial \Phi_{MA}}{\partial t} = \left(\mu_{MA} - r_{MA} - ex_{MA} - m_{MA} - G_{MA}\right) \Phi_{MA}$	Eq. 9-23
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------

 $\mu_{\rm MA}$ – macroalgae gross growth rate [day⁻¹]

 r_{MA} – macroalgae total respiration rate [day⁻¹]

 ex_{MA} – macroalgae excretion rate [day⁻¹]

 $m_{\rm MA}$ – macroalgae natural mortality rate (non-predatory) day⁻¹]

 $G_{\rm MA}$ – grazing rate on macroalgae [day⁻¹]

 $\Psi(T)$ – temperature limitation factor¹

 $\Psi(I)$ – light limitation factor

 $\Psi(N)$ – nitrogen limitation factor

 $\Psi(P)$ – phosphorous limitation factor

9.4.1 Light Limiting Factor

$$\Psi(I) = \frac{e}{k.z} \left(e^{-I_o e^{-kz} / I_{opt}} - e^{-I_0 / I_{opt}} \right)$$
 Eq. 9-25

h - minimum between water column height and macroalgae height [m]

 I_o – incident radiation on macroalgae [W.m⁻²]

I_{opt} – optimum light intensity for macroalgae photosynthesis [Wm⁻²]

 $k_{\rm MA}$ – light extinction coefficient in the macroalgae zone $\rm [^{m-1}]$

$k_{MA} = \frac{a_{abs} \Phi_{MA}}{Min(h_{MA}, h_{WC})} \times Max\left(\frac{h_{MA}}{h_{WC}}, 1\right)$	Eq. 9-26
$h_{\scriptscriptstyle M\!A}$ – macroalgae height [m]	

 $h_{\scriptscriptstyle WC}$ – water column height [m]

 $\Phi_{\rm MA}$ – biomass concentration [kgC.m⁻²]

$$a_{abs}$$
 – carbon-specific shading area [m².kg⁻¹]

9.4.2 Nutrients Limitation Factor

$\Psi(N) = \frac{\Phi_{NH4} + \Phi_{NO3}}{K_N^X + \Phi_{NH4} + \Phi_{NO3}}$	Eq. 9-27
$\Psi(P) = \frac{\Phi_{IP}}{K_P^X + \Phi_{IP}}$	Eq. 9-28

X = Phytoplankton, MacroAlgae

K_N^X – nitrogen half-saturation constant [mgN.L ⁻¹]	
K_N^X – phosphorus half-saturation constant [mgP.L ⁻¹]	

9.4.3 Respiration

$r_e^X = K_{re}^X e^{0.069T}$	Eq. 9-29
$r_p^X = K_{rp}^X \mu_X$	Eq. 9-30
$r_X = r_e^X + r_p^X$	Eq. 9-31

X = Phytoplankton, MacroAlgae

 r_X – total respiration rate [day⁻¹]

 r_e^X – endogenous (or dark or basal) respiration rate [day⁻¹]

 r_p^X – photorespiration respiration rate [day⁻¹]

K_{re}^{X} – endogenous respiration constant [day ⁻¹]	
K_{rp}^{X} – fraction of actual photosynthesis which is oxidised by photorespiration [adim]	

9.4.4 Excretion

$ex_{X} = K_{e}^{X} \cdot \mu_{X} \cdot \left(1 - \Psi(I)\right)$	Eq. 9-32

X = Phytoplankton, MacroAlgae

9.4.5 Natural Mortality

$m_{X} = m_{\max}^{X}(T_{ref}) \frac{\frac{\Phi_{X}}{\mu_{X}}}{K_{m}^{X} + \frac{\Phi_{X}}{\mu_{X}}}$	Eq. 9-33
$m_{\max}^X(T_{ref})$ – maximum mortality rate at the reference temperature [day ⁻¹]	
K_m^X – mortality half-saturation rate	
[Phytoplankton: mgC.L ⁻¹ day ⁻¹ ; MacroAlgae: kgC.m ⁻² .day ⁻¹]	

Symbol	Coefficient	Unit	Default	Reference
			Value	
$G_{\scriptscriptstyle M\!A}$	grazing rate on macroalgae	day⁻¹	0.0008	Valiela (1995)
$\mu_{\max}^{MA}(T_{ref})$	maximum gross growth rate at the reference temperature	day ⁻¹	0.4	Coffaro & Sfriso (1997); Coffaro & Bocci (1997)
I _{opt}	optimum light intensity for macroalgae photosynthesis	W.m ⁻²	90.0	EPA (1985)
$h_{\scriptscriptstyle M\!A}$	average macroalgae bed height	m	0.2	Ferreira (1989)
$a_{\scriptscriptstyle M\!A}$	Carbon specific shading area	m ² kgC ⁻¹	5.55	Calibration
$K_{\scriptscriptstyle N}^{\scriptscriptstyle M\!A}$	nitrogen half-saturation constant	mgN.L ⁻¹	0.065	EPA (1985), Valiela (1995)
K_P^{MA}	phosphorus half-saturation constant	mgP.L⁻¹	0.001	EPA (1985), Valiela (1995)
K_{re}^{MA}	endogenous respiration constant	day⁻¹	0.00175	EPA (1985), Pina (2001)
K_{rp}^{MA}	fraction of actual photosynthesis which is oxidised by photorespiration	adim	0.018	EPA (1985), Pina (2001)
K_e^{MA}	excretion constant	adim	0.008	MOHID (2000
$m_{\max}^{MA}(T_{ref})$	maximum mortality rate at the reference temperature	day ⁻¹	0.003	Valiela (1995)
K_m^{MA}	Macroalgae mortality half-saturation rate	kgC.m ⁻ ².day ⁻¹	0.03	MOHID (2000

$\alpha_{\scriptscriptstyle N:C}^{\scriptscriptstyle MA}$	macroalgae N:C ratio (Atkinson's ratio)	mgN.mgC ⁻¹	0.18	Atkinson & Smith (1983),
				Baird (2001)
$\alpha_{P:C}^{MA}$	macroalgae P:C ratio	mgP.mgC ⁻¹	0.005	Atkinson & Smith (1983),
				Baird (2001)
$f_{\it in/MA}$	soluble inorganic fraction of the macroalgae excretions	adim	0.25	MOHID (2000
$f_{\it orgD/MA}$	dissolved organic fraction of the macroalgae organic excretions	adim	0.25	MOHID (2000
T_{\min}^{opt}	minimum temperature for the optimal growth interval	°C	12	Jones (1993)
T_{\max}^{opt}	maximum temperature for the optimal growth interval	°C	24	Jones (1993)
T_{\min}	minimum tolerable temperature	°C	6	Jones (1993)
$T_{\rm max}$	maximum tolerable temperature	°C	37	Jones (1993)
K ₁	constant to control temperature response curve shape	adim	0.3	MOHID (2000)
K ₂	constant to control temperature response curve shape	adim	0.98	MOHID (2000)
K ₃	constant to control temperature response curve shape	adim	0.98	MOHID (2000)
K4	constant to control temperature response curve shape	adim	0.01	MOHID (2000)
F_{dep}^{\max}	Maximum deposition flux	gCm ⁻² s ⁻¹	0.005	Dronkers & Leussen (1988)
$ au_{ero}^{*}$	Detachment critical shear stress	Pa	1	Salomonsen <i>et al.</i> (1999)

Table 9.4-1: Values used in the standard model for the macroalgae variables

9.5 Zooplankton

Zooplankton is described in terms of carbon concentration (mg C l⁻¹) and the net growth rate, g_z (day⁻¹), is obtained from lvlev, (1945) adapted by Parsons *et al.*, (1967). Respiration and non-predatory mortality of the zooplankton (day⁻¹), r_z and m_{Z_0} are considered functions of temperature, being treated as one variable. The predatory mortality, G_z , depends on the zooplankton concentration.



Figure 9-4 represents the internal flux of zooplankton.



9.5.1 Equations

The growth of zooplankton is given by:

$$\frac{\partial \Phi_Z}{\partial t} = (g_z - r_z - m_z) \cdot \Phi_Z \cdot G_Z$$
 Eq. 9-34

The growth rate, g_z (day⁻¹), is given by:

$$g_{z} = g_{\max} \cdot (T_{ref}) \cdot \Psi(T)_{Z} \cdot (1 - e^{-\Lambda(\Phi_{Phy} - \Phi_{Phy_{0}})})$$
 Eq. 9-35

where g_{max} represents the maximum growth rate, Δ stands for the lvlev constant, Ω_{Phy0} represents the minimum concentration of phytoplankton for grazing. The temperature limitation is calculated in the same way as for phytoplankton, but with other constants.

The natural mortality and respiration, $r_z + m_z$ (day⁻¹), is given by:

$$r_z + m_z = d_z \cdot (T_{ref}) \cdot \Psi(T)$$
 Eq. 9-36

where d_z represents the natural mortality and respiration rate.

Grazing, G_z (day⁻¹), is given by:

$$G_z = e_z Z$$
 Eq. 9-37

	Symbol	Coefficient	Unit	Value
	g _{max}	Maximal growth Rate	d ⁻¹	0.1
	Δ	Ivlev constant	-	13.0
	Phy ₀	Minimum phytoplankton concentration for grazing	mgC/l	0.045
	dz	Non predatory mortality and respiration rate	d ⁻¹	0.036
	ez	Predatory mortality rate	d⁻¹.	0.01
Temperature limitation				
Topt _{min} Zo		Minimal temperature for an optimal zoo growth	°C	24.8
	Topt _{maxZ0}	Maximal temperature for an optimal zoo growth	°C	25.1
	Temp _{min} Zo	Minimal temperature for zoo growth	°C	5.0
	Temp _{max} Zo	Maximal temperature for zoo growth	°C	35.0
	$lpha_{Phy}$	Redfield ratio (N:C)	-	0.18

where e_z represents the predatory mortality rate.

Table 9.5-1: Values used in the standard model for the zooplankton variable

9.6 Nitrogen

In the Mohid water quality module, the nitrogen appears as organic and inorganic nitrogen.

The inorganic nitrogen is divided into ammonia (NH_4) , nitrite (NO_2) and nitrate (NO_3) .

The organic nitrogen is divided into particulate organic nitrogen (PON), dissolved organic nitrogen non refractory (DONnr) and dissolved organic nitrogen refractory (DONre). DONnr includes small molecular substrates, assumed to be degraded in the day of production and DONre with a longer turn over.

9.6.1 Ammonia

The sources of ammonia are the organic forms of nitrogen (PON, DONnr and DONre) due to decay and phytoplankton due to the dark respiration process. The sinks of ammonia are nitrite (nitrification) and phytoplankton (uptake).

Figure 9-5 represents the internal fluxes of ammonia modeled by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-5: Internal Flux of Ammonia

The rate equation of ammonia is given by:

The assimilation rate of NH₄, μ_{NH4} , is given by:

$$\mu_{NH4} = \beta_{NH4} \alpha_{N:C} \mu_{Phy}$$
 Eq. 9-39

where β_{NH4} is the ammonia preference factor given by:

$$\beta_{NH4} = \frac{\Phi_{NH_4} \cdot \Phi_{NO_3}}{\left(K_N + \Phi_{NH_4}\right)\left(K_N + \Phi_{NO_3}\right)} \cdot \frac{\Phi_{NH_4} \cdot K_N}{\left(K_N + \Phi_{NH_4}\right)\left(K_N + \Phi_{NO_3}\right)}$$
 Eq. 9-40

and $\alpha_{N:C}$ represents the Redfield ratio between N:C.

The mineralization rate of DONre, φ_{Nre} is given by:

$$\varphi_{Nre} = M_{DONre} \theta_{DONre} (T - T_{ref}) \frac{\Phi_{Phy}}{K_{PhyNut \operatorname{Rege}} + \Phi_{Phy}}$$
Eq. 9-41

where

 M_{DONre} – reference rate for the mineralization of DONre

 θ_{DONre} – temperature coefficient for the mineralization of DONre

 T_{ref} – reference temperature

 $K_{PhyNutRege}$ – half saturation constant for the regeneration of phytoplankton

The mineralization rate of DONnr, φ_{Nnr} is given by:

$$\varphi_{Nnr} = M_{DONnr} \theta_{DONnr} (T - T_{ref})$$
 Eq. 9-42

where

 M_{DONnr} – reference rate for the mineralization of DONnr

 θ_{DONnr} – temperature coefficient for the mineralization of DONnr

The dissolution rate of PON, φ_{det} , is given by:

$$\varphi_{det} = M_{det} \theta_{det} (T - T_{ref})$$
 Eq. 9-43

where

 M_{det} – reference rate for the dissolution of PON

 θ_{det} – temperature coefficient for the dissolution

9.6.2 Nitrite

The source of nitrite, modeled by *Mohid*, is ammonia and the sink is nitrate. Figure 9-6 represents the internal fluxes of nitrite modeled by *Mohid's* water quality module.





The rate equation of nitrite is given by:

$$\frac{\partial \Phi_{NO2}}{\partial t} = \varphi_{2N} \Phi_{NH4} - \varphi_{2N} \phi_{NO2}$$
 Eq. 9-44

with the rate of nitrification, φ_{2N} is given by:

$$\varphi_{2N} = M_{nit} \theta_{nit} \left(T - T_{ref} \right) \frac{\Phi_{O2}}{K_{nit} + \Phi_{O2}}$$
Eq. 9-45

where

 M_{nit} – reference rate of nitrification

 θ_{nit} – temperature coefficient for nitrification

 K_{nit} – half saturation constant for nitrification

9.6.3 Nitrate

The source of nitrate, modeled by *Mohid*, is nitrite and the sink the uptake by phytoplankton. Figure 9-7 represents the internal fluxes of nitrate modeled by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-7: Internal Flux of Nitrate

The rate equation of nitrate is given by:

$$\frac{\partial \Phi_{NO3}}{\partial t} = \varphi_{2N} \Phi_{No2} - \varphi_{2N} \phi_{NO3} - \mu_{NO3}$$
 Eq. 9-46

The assimilation rate of N0₃, μ_{NO3} , is given by:

$$\mu_{NO3} = (1 - \beta_{NH4}) \alpha_{N:C} \mu_{Phy}$$
 Eq. 9-47

9.6.4 Particulate organic nitrogen – PON

The sources of PON are the mortality of phytoplankton and zooplankton and the sinks are the mineralization to ammonia and the decomposition to DONre.

Figure 9-8 represents the internal fluxes of PON modeled by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-8: Internal Flux of PON

The rate equation of the PON is given by:

$$\frac{\partial \Phi_{PON}}{\partial t} = \left[\left(1 - f_{orgD/Phy} \right) \left(1 - f_{in/Phy} \right) ex_{Phy} + m_{Phy} \right] \Phi_{Phy} + \left[\left(1 - f_{orgD/Z} \right) \left(1 - f_{in/Z} \right) ex_{Z} + m_{Z} \right] \Phi_{Z} - \varphi_{det} \Phi_{PON} \right]$$
Eq. 9-48

All variables have the same meaning as in the previous paragraphs.

9.6.5 Dissolved organic nitrogen non refractory – DONnr

The sources of DONnr are the mortality and the excretions of phytoplankton and zooplankton and the sinks are the mineralization to ammonia.

Figure 9-9 represents the internal fluxes of DONnr modeled by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-9: Internal Flux of DONnr

The rate equation of the DONnr is given by:

$$\frac{\partial \Phi_{DONnr}}{\partial t} = f_{orgD/Phy} (1 - f_{in/Phy}) e x_{Phy} \Phi_{Phy}$$

+
$$f_{orgD/Z}(1 - f_{in/Z})ex_Z\Phi_Z - \varphi_{Nnr}\Phi_{DONnr}$$
 Eq. 9-49

All variables have the same meaning as in the previous paragraphs.

9.6.6 Dissolved organic nitrogen refractory – DONre

The source of DONre is the decomposition of the PON and the sink is the mineralization to ammonia.

Figure 9-10 represents the internal fluxes of DONre modeled by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-10: Internal Flux of DONre

The rate equation of the DONre is given by:

$$\frac{\partial \Phi_{DONre}}{\partial t} = \varphi_{det} \Phi_{PON} (1 - f_{orgP/Phy}) - \varphi_{Nr} \Phi_{DONre}$$
Eq. 9-50

All variables have the same meaning as in the previous paragraphs.

Symbol	Coefficient	Unit	Value
T _{ref}	Reference temperature	°C	25
M _{DONre}	Reference rate for mineralization	d⁻¹	0
M _{DONnr}	Reference rate for mineralization	d⁻¹	0.1
$\theta_{\text{ DONre}}$	Temperature coefficient for mineralization of DONre	-	1.02
θ DONnr	Temperature coefficient for mineralization of DONnr	-	1.02
$K_{PhNutRege}$	Half saturation constant for phytoplankton regeneration	-	1.
M _{nitri}	Reference rate for nitrification		0.1
θ_{nitri}	Temperature coefficient for nitrification	-	1.08
K _{nitri}	Half saturation constant for nitrification		2.0
M _{det} .	reference rate for PON dissolution	d⁻¹	0.1
θ det	Temperature coefficient for decomposition	-	1.02
M _{denit}	reference rate for denitrification	d⁻¹	0.1
θ denit	Temperature coefficient for denitrification	-	1.046
K _{denit}	Half saturation constant for denitrification	mgO ₂ .L ⁻¹	0.1
αPhy	N:C ratio for phyto	-	0.18
α_{Zo}	N:C ratio for zoo		0.24

Table 9.6-1: Values used in the standard model for the nitrogen variables

9.7 Phosphorus

In the Mohid water quality module, phosphorus appears, like nitrogen, in an organic and an inorganic form.

The inorganic phosphorus is assumed to be available as orthophosphate (PO_4) for uptake by phytoplankton.

The organic phosphorus is divided into particulate organic phosphorus (POP), dissolved organic phosphorus non refractory (DOPnr) and dissolved organic phosphorus refractory (DOPre). The rate equations of phosphorus are implemented in the same way as the nitrogen cycle, except that there is just one compartment of inorganic phosphorus.

9.7.1 Inorganic Phosphorus

Figure 9-11 represents the internal fluxes of inorganic phosphorus modeled by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-11: Internal Flux of Inorganic Phosphorus

The rate equation of inorganic phosphorus is given by:

$$\frac{\partial \Phi_{PO4}}{\partial t} = (f_{in/Phy}ex_{Phy} - \mu_{PO4})\Phi_{Phy} + f_{in/Z}ex_{z}\Phi_{z} + \varphi_{Pre}\Phi_{DOPre} + \varphi_{Pnr}\Phi_{DOPnr} + f_{orgP/Phy}\varphi_{det}\Phi_{POP}$$

$$9-5$$

$$1$$

The assimilation rate of PO₄, μ_{PO4} , is given by:

$$\mu_{PO4} = \alpha_{N \cdot C} \mu_{Phv}$$
 Eq. 9-52

 α_{Phy} represents the Redfield ratio between N:P.

9.8 Oxygen

Figure 9-12 represents the internal fluxes of oxygen by *Mohid's* water quality module.



Figure 9-12: Internal Flux of Inorganic Oxygen



 $\alpha_{_{MinO:N}}$ Mineralization oxygen/ nitrogen ratio

 $lpha_{{\it MinO:P}}$ Mineralization oxygen/ phosphorus ratio

10 The Surface Module

10.1 Introduction

The surface module stores the boundary conditions at the surface of the water column. These boundary conditions can be divided in two types of boundary condition. One type of boundary condition which are given directly be the user, usually meteorological data (wind velocity, air temperature, dew point, evaporation, cloud cover) or boundary conditions calculated automatically by the model from the meteorological data/conditions of the water column (wind stress, solar radiation, latent heat, infrared radiation, sensible heat, oxygen flux). The information flux between the surface module and other modules is shown in Figure 10-1.





10.2 Wind

Wind stress is calculated according to a quadratic friction law:

$$\vec{\tau w} = C_D \rho_a \vec{W} |\vec{W}|$$
Eq. 10-1

where C_D is a drag coefficient that is function of the wind speed, ρ_a is air

density and W is the wind speed at a height of 10 m over the sea surface.

The drag coefficient is computed according to Large and Pond [1981]:

$$C_D = 1.14e^{-3}$$
 (W<10m/s) Eq. 10-2

$$C_D = 4.4e^{-4} + 6.5e^{-5} \vec{W} | \vec{W} |$$
 (10m/s

10.3 Heat fluxes

The heat fluxes at the surface can be separated into five distinctive fluxes: solar shortwave radiation, atmospheric long-wave radiation, water long-wave radiation, sensible heat flux and latent heat flux. These fluxes can be grouped into two ways: in (*i*) radiative fluxes (first three fluxes) and (*ii*) non-radiative fluxes (last two fluxes) or in (*iii*) fluxes independent of the water temperature (first two fluxes) and in (*iv*) fluxes dependent of the water temperature (last three fluxes).

10.3.1 Solar radiation

Solar radiation is an important ecological parameter, and is often the key driving force in ecological processes (Brock, 1981). The solar radiation flux of short wavelength is compute by:

$$Q = Q_0 A_t (1-0.65 C_n^2) (1-R_s)$$
 Eq. 10-4

where Q_0 is the solar radiation flux on top atmosphere (Wm²), A_t the coefficient for atmospheric transmission, C_n the cloud cover percentage and R_s stands for albedo (0.055). The solar radiation flux on top atmosphere can be expressed as:

$$Q_0 = \frac{I_0}{r^2} senz$$
 Eq. 10-5

where I_0 stands for the solar constant which is the energy received per unit time, at Earth's mean distance from the Sun, outside the atmosphere, a standard value, used is 1353 Wm⁻² (Brock, 1981), *r* stands for the radious vector and z stands for the solar high.

10.3.1.1 Radius vector, r

During its revolution around the Sun, the Earth's distance varies with time of year by 3.0%, duo to the Earth's eccentric orbit. This eccentricity influences in a minor way the amount of solar radiation impinging on the Earth's surface. The radius vector of Earth, *r*, expresses this ellipticity and can be calculated approximately from the following equation (Nicholls and Child, 1979 in Brock, 1981):

$$r = 1.0 + 0.017 \cos\left[2\pi \frac{(186 - d)}{365}\right]$$
 Eq. 10-6

where *d* stands for Julian Day.

10.3.1.2 Solar High

Solar radiation at any location on Earth is influenced by the motions which the Earth makes in relation to the Sun. The Earth is tilted 23.45° from the plane of the Earth's orbit. The declination of Earth is the angular distance at solar noon between the Sun and the Equator, north-positive. Declination depends only on the day of the year, and will be opposite in the Southern Hemisphere. The declination is obtained precisely from ephemeris tables, but can be calculated close enough for all practical purposes from the equation given by Cooper (1969 in Brock, 1981):

D1(declination) = 23.45 sin
$$[2\pi(284 + d)/365]$$
 Eq. 10-7

The other major motion is the daily rotation of the Earth around itself. The Earth moves 15° per hour and the sunset (or sunrise) hour –angle, W1, is the angle between the setting Sun and the south point. The value W1 can be calculated if the latitude (L) and declination are known:

In this equation, if L and D1 are in degrees then W1 will be given in degrees. From W1, the daylength in hours, L1, can be calculated from the equations:

Sunrise =
$$12 - \frac{1}{2} L1$$
 Eq. 10-9

The hour-angle at any given time can be calculated from one of the following equations:

W2 =
$$(T+12)^*\pi/12$$
, T<12 Eq. 10-11
W2 = $(T-12)^*\pi/12$, T>12

Where T is the time (h) from midnight.

The Zenith angle or angular elevation of the Sun above the horizon, Z, can be calculated if the declination, D1, the latitude, L1, and the hour-angle, W2, are known:

$$Cos (Z) = sin(D1)sin(L) + cos(D1)cos(L)cos(W2)$$
Eq. 10-12

As a consequence of attenuation, radiation has two distinct directional properties when it reaches the ground.

10.3.1.3 Direct Radiation

Direct radiation arrives from the direction of the solar disc and includes a small component scattered directly forward. The term diffuse describes all other scattered radiation received from the blue sky and from clouds, either by reflection or by transmission. Direct radiation at the ground, measured at right angles to the beam, rarely exceeds 75% of the Solar Constant, i.e. about 1030Wm⁻². The minimum loss of 25% is attributable to molecular scattering and to absorption in almost equal proportions. (Monteith and Unsworth, 1990)

10.3.1.4 Diffuse radiation

Beneath a clean, cloudless atmosphere, the absolute amount of diffuse radiation increases to a maximum somewhat less then 200 Wm² when the zenith angle of the sun (Z) is less then 50° and the ratio of diffuse (Q_{dif}) to total radiation (Q_0) falls between 0.1 and 0.15. With increasing cloud amount also, Q_{dif} / Q_0 increases and reaches unity when the sun is obscured by dense cloud: but the absolute level of Q_d is maximal when

cloud cover is about 50%.

The coefficient for atmospheric transmission is computed by the method followed by Rosati and Miyakoda (1988 in Portela, 1996):

$$A_{t} = A_{dir} + A_{dif} \qquad \qquad Eq. \ 10-13$$

where A_{dir} is the direct fraction and A_{dif} is the diffuse fraction of solar radition on top atmosphere that reaches the surface under a clear sky.

The direct fraction A_{dir} is given by:

$$A_{dir} = \tau^m \qquad \qquad \text{Eq. 10-14}$$

where τ = 0.74 is atmospheric transmission coefficient for direct radiation and *m* the sectional mass, compute by the following expression:

where is the zenith angle in radians.

The diffuse fraction A_{dif} is given by:

$$A_{dif} = \frac{1 - A_a - A_{dir}}{2}$$
 Eq. 10-16

were A_0 = 0.09 is the absorption coefficient due to water vapour and ozone.

10.3.2 Infrared radiation flux

The infrared radiation flux is computed in concordance with the *Stefan-Boltzman* law:

$$R_{br} = \varepsilon * \sigma * (273.15 + T_w)^4$$
 Eq. 10-17

where R_{br} represents the infrared radiation (*W*/*m*²), ε the emissivity of water (0.97), σ the Stefan-Boltzman constant (5.669*10⁻⁰⁸ W/m²/K⁴) and T_w the water temperature.

10.3.3 Latent heat flux

The latent heat flux decreases the heat inside the water body. It represents the quantity of heat for the evaporation. The equation implemented in the model *Mohid* is known by the law of *Dalton:*

$$H_L = (19.0 + 0.95U_w^2) * (e_{s,w} - r_h * e_{s,a})$$
 Eq. 10-18

where H_L represents the latent heat flux (m/s), $e_{s,w}$ water pressure of saturation (mmHg), r_h for the relative humidity and $e_{s,a}$ the air pressure of saturation.

The model just considers the latent heat in the case of evaporation. In the inverse process, the model considers that the heat gain remains in the atmosphere.

10.3.4 Sensible heat flux

The difference between the air temperature and the water temperature is responsible for the sensible heat flux. The equation implemented in the model *Mohid* is known by the law of *Bowen*:

$$H_s = C_b * (19.0 + 0.95 * U_w^2) * (T_w - T_a)$$
 Eq. 10-19

Where H_s represents the sensible heat flux (W/m²), C_b is the *Bowen's* coeficient (0.47mmHg/K), U_w the wind speed 10m above the surface of the water, T_w the water temerature and T_a the air temperature (K).

10.4 Gas flux

Actually just the oxygen flux is implemented. The formula used is indicated below:

where K_L represents the velocity of the gas transfer (m/s), α and β are coefficients depending in on the wind velocity, U_w:

$$\alpha$$
 = 0.2 if W <3.5 and α = 0.057 if W > 3.5

 β = 1.0 if W <3.5 and β = 2.0 if W >3.5

11 The Hydrodynamic File Module

11.1 Introduction

In this section the hydrodynamic file module of the model *Mohid* is described. This module can be seen as an auxiliary module, which permits the user of the model *Mohid* to integrate the hydrodynamic solution in space and in time and store this solution in a file. This file can later be used to simulate longer periods, like water quality simulation which needs simulation times for at least one year.

The special integration consists in the integration of several grid cells into one single cell. This grouping can be done for any quadratic group of grid cells, like 2x2 or 3x3. This grouping results in a drastic reduction of computing points. In the case of space integration 2x2, the resulting domain will just contain one forth of grid points, each with the double size in the horizontal and vertical extension. Figure 11-1 shows a schematic representation of the space integration 2x2. The number of the overall grid points reduces from 16 to 4.



Figure 11-1: Schematic representation of the space integration

The time integration consists in the integration along several time steps of the hydrodynamic solution. The time integration can be directly connected to the space integration, once the larger grid spacing obtained by the space integration, allows the model to run with a larger time step. In the case of mass transport, the celerity which controls the stability of the model isn't the propagation of the pressure wave, but the maximum flow velocity. In the resulting file, the hydrodynamic solution of the in time and in space integrated hydrodynamic solution is stored, which in posterior simulation can be used to obtain results more quickly. Regarding time, there are two different ways of storing this information: the information can be stored as a integrated solution with a given start date and a given end date, or as a solution which repeats itself (one tidal cycle).

The usage of the hydrodynamic file module has shown that the errors introduced in the integrated solution are usually small, and not significant for long-term water quality simulations.

The information flux of the hydrodynamic file module, relative to the other modules of *Mohid*, is shown in Figure 11-2. At the top the process of the file recording is shown and at the bottom the process of getting the solution from the file is shown.





11.2 Methodology

The space integration is divided into to steps:

- 1. Compute an integrated bathymetry, base on the bathymetry with a higher resolution
- 2. In each integration step, the sum of all water fluxes along a given face is kept in the output file. The average surface elevation is also kept in the output file.

11.2.1 Integration of the bathymetry

The integration of the bathymetry can be done in two different ways. In both ways, before the bathymetry is integrated, the land points with are filled with the minimum depth of the cells which are to be integrated.

The first way of the integration is designated as "Mean Integration". This methodology calculates the average depth of the cells to be integrated, using this average as the depth for the new bathymetry. Figure 11-3 shows an integration of the bathymetry by the "Mean Integration" methodology. Water points are colored blue and land points are colored grey.



Figure 11-3: Integration of the bathymetry using the "Mean Integration"

The second way of integration is designated as "Maximum Integration". This methodology uses the maximum depth of all cells, multiplied by the area of each cell and then divided by the total area of the water points.



Figure 11-4: Integration of the bathymetry using the "Maximum Integration"

11.2.2 Integration of the water fluxes

The water flux between two cells is calculated from the average water flux between these cells. These fluxes can be integrated over several time steps.

$$Q_i = \sum_{1}^{nCells} \sum_{1}^{nSteps} q_i / nSteps$$
 Eq. 11-1

Figure 11-5 shows a schematic representation of the integrated water fluxes over the integrated bathymetry.



Figure 11-5: Schematic representation of the water flux integration

12 Bibliography

12.1 General Overview

Bowie, G. L., W. B. Mills, D. B. Porcella, C. L. Cambell, J. R. Pagendorf, G.
L. Rupp, K. M. Johnson, P. W. Chan, S. A. Gherini, and C. E. Chamberlin (1985) – Rates, Constants and Kinetic Formulations in Surface Water Quality Modeling. U. S. Environmental Protection Agency

Braunschweig, F (2001) – Generalização de um modelo de circulação costeira para albufeiras, MSc. Thesis, Instituto Superior Técnico, Technical University of Lisbon

Cancino, L. and R. Neves (1999) - Hydrodynamic and sediment suspension modelling in estuarine systems. Part II: Application to the Western Scheldt and Gironde estuaries, Journal of Marine Systems 22, 117-131

Coelho, H., A. Santos, T. L. Rosa and R. Neves (1994) - Modelling the wind driven flow off Iberian Peninsula, *GAI*A, 8, 71-78

Decyk, V. K., C. D. Norton, B. K. Szymanski (1997) – Expressing Object-Oriented Concepts in Fortran90. *ACM Fortran Forum, Vol. 16*

Leitão, P. C. (1996) – Modelo de Dispersão Lagrangeano Tridimensional. Ms. Sc. Thesis, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

Neves, R. J. J. (1985) - Étude Experimentale et Modélisation des Circulations Trasitoire et Résiduelle dans l'Estuaire du Sado. Ph. D. Thesis, Univ. Liège

Neves, R., H. Coelho, P. Leitão, H. Martins, and A. Santos (1998) - A numerical investigation of the slope current along the western European margin. In: Burgano V., Karatzas G., Payatakas A., Brebbia C., Gray W. and Pinder G. (Ed.), Computational Methods in Water Resources XII, 2, 369-376, 1998.

Martins, F. (1999) – Modelação Matemática Tridimensional de Escoamentos Costeiros e Estuarinos usando uma Abordagem de Coordenada Vertical Genérica. Ph. D, Thesis, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Tecnico

Martins, F., P. Leitão, A. Silva and R. Neves (2000) - 3D modeling in the Sado estuary using a new generic vertical discretization approach, submitted to *Oceanologica Acta*

Miranda, R. (1999) – Nitrogen Biogeochemical Cycle Modeling in the North Atlantic Ocean. Tese de Mestrado, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

Miranda, R., F. Braunschweig, P. Leitão, R. Neves, F. Martins and A. Santos (2000) – Mohid 2000, A Costal integrated object oriened model. Hydraulic Engineering Software VIII, WIT Press

Montero, P., M. Gómez-Gesteira, J. J. Taboada, M. Ruiz-Villarreal., A. P. Santos, R. J. J. Neves, R. Prego and V. Pérez-Villar (1999) - On residual circulation of Vigo Ría using a 3D baroclinic model, Boletín Instituto Español de Oceanografía, no 15. SUPLEMENTO-1

Montero, P. (1999) - Estudio de la hidrodinámica de la Ría de Vigo mediante un modelo de volúmenes finitos (Study of the hydrodynamics of the Ría de Vigo by means of a finite volume model), Ph.D. Dissertation, Universidad de Santiago de Compostela, in Spanish

Pérez-Villar, V. (1999) - "Ordenación Integral del Espacio Maritimo-Terrestre de Gali-cia: Modelización informática" (Integrated Management of the Galician Maritime-Terrestrial Space: Numerical Modelling). Final report by the Grupo de Física Non Lineal, Consellería de Pesca, Marisqueo e Acuicultura. Xunta de Galicia.

Santos, A. J. (1995) - Modelo Hidrodinâmico Tridimensional de Circulação Oceânica e Estuarina. Ph. D, Thesis, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

Taboada J.J., R. Prego, M. Ruiz-Villarreal, P. Montero, M. Gómez-Gesteira, A. Santos and V. Pérez-Villar (1998) - Evaluation of the seasonal variations in the residual patterns in the Ría de Vigo (NWSpain) by means of a 3D baroclinic model, Estuarine Coastal and Shelf Science 47, pp. 661-670

Taboada, J.J., M. Ruíz-Villarreal, M. Gómez-Gesteira, P. Montero, A. P. Santos, V. Pérez-Villar and R. Prego (2000) - Estudio del transporte en la Ría de Pontevedra (NOEspaña) mediante un modelo 3D: Resultados preliminares, In: Estudos de Biogeoquímica na zona costeira ibérica,Eds. A.Da Costa, C. Vale and R. Prego, Servicio de Publicaciones da Universidade de Aveiro in press.

Taboada, J.J. (1999) - Aplicación de modelos numéricos al estudio de la hidrodinámica y del flujo de partículas en el Mar Mediterráneo (Application of numerical models for the study of hydro-dynamics and particle fluxes in the Mediterranean Sea), Ph. D. Dissertation, Universidad de Santiago de Compostela. In Spanish

Villarreal, M.R., P. Montero, R. Prego, J.J. Taboada, P. Leitao, M. Gómez-Gesteira, M. de Castro and V. Pérez-Villar (2000) - Water Circulation in the Ria de Pontevedra under estuarine conditions using a 3d hydrodynamical model, submitted to Est. Coast. and Shelf Sc.

12.2 The Geometry Module

Arakawa, A. and V.R. Lamb (1977) - Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA General Circulation Model. Methods of Computational Physics, 17, pp.174-264

Chippada S., C. Dawson, M. Wheeler, (1998) - Agodonov-type finite volume method for the system of shallow water equations, Computer methods in applied mechanics and engineering. 151(01): 105-130

Hirsch, C. (1988) - Numerical computation of internal and external flows.Vol I: Fundamentals of numerical discretization. Wiley Series in NumericalMethods in Engineering. John Wiley and Sons, 515 pp., Chichester

Martins, F. (1999) – Modelação Matemática Tridimensional de Escoamentos Costeiros e Estuarinos usando uma Abordagem de Coordenada Vertical Genérica. Ph. D, Thesis, Universidade Técnica de

Lisboa, Instituto Superior Tecnico

Martins, F., P. Leitão, A. Silva and R. Neves (2000) - 3D modeling in the Sado estuary using a new generic vertical discretization approach, submitted to *Oceanologica Act*a

Montero, P. (1999) - Estudio de la hidrodinámica de la Ría de Vigo mediante un modelo de volúmenes finitos (Study of the hydrodynamics of the Ría de Vigo by means of a finite volume model), Ph.D. Dissertation, Universidad de Santiago de Compostela, in Spanish

12.3 The Hydrodynamic Module

Abbott, M.B., A. Damsgaardand and G.S. Rodenhuis (1973) - System 21, Jupiter, a design system for two dimensional nearly horizontal flows. J. Hyd. Res, 1, 1-28

Backhaus, J (1985) - A three dimensional model for the simulation of shelf sea dynamics. Dt. Hydrogr.Z., 38, 165-187.

Fletcher, C.A.J. (1991) - Computational techniques for fluid dynamics. Volume I. 2nd Edition. Springer Series in Computational Physics, Springer Verlag, 401 pp., New York

James, I.D. (1987) - A general three-dimensional eddy-resolving model for stratified seas. In: Three-dimensional models of marine and estuarine dynamics, edited by J.C.Nihoul and B.M.Jamart, Elsevier Oceanography Series 45 Amsterdam, 1-33

Leendertsee, J.J. (1967) - Aspects of a computational model for long water wave propagation. Rand Corporation, Memorandum RM-6230-RC, Santa Monica, 1970.

Martins, F. (1999) – Modelação Matemática Tridimensional de Escoamentos Costeiros e Estuarinos usando uma Abordagem de Coordenada Vertical Genérica. Ph. D, Thesis, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Tecnico

Montero, P. (1999) - Estudio de la hidrodinámica de la Ría de Vigo

mediante un modelo de volúmenes finitos (Study of the hydrodynamics of the Ría de Vigo by means of a finite volume model), Ph.D. Dissertation, Universidad de Santiago de Compostela, in Spanish

Palma, E. and R. P. Matano (1998) - On the implementation of passive open boundary conditions for a general circulation model: The barotropic mode. Journal of Geophysical Research, 103, 1319-1342

Santos, A. J. (1995) - Modelo Hidrodinâmico Tridimensional de Circulação Oceânica e Estuarina. Ph. D, Thesis, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

12.4 The Lagrangian Module

Allen, C. M. (1982) - Numerical simulation of contaminant dispersion in estuary flows. Proc. R. Soc. London. A 381, 179-194 (1982).

Costa, M. V. (1991) - A Three-Dimensional Eulerian-Lagrangian Method for Predicting Plume Dispersion in Natural Waters - Diplôme d'Etudes Approfondies Européen en Modélisation de l'Environnement Marin -ERASMUS

Monteiro, A. J. (1995) - Dispersão de Efluentes Através de Exutores Submarinos. Uma contribuição para a modelação matemática. Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

12.5 The Module Oil

Buchanan I., N. Hurford (1988) - Methods for predicting the physical changes in oil spilt at sea. Oil & Chemical Pollution, 4(4), pp. 311-328

Delvigne G.A.L., C.E. Sweeney (1998) - Natural Dispersion of Oil. Oil & Chemical Pollution. 4, pp. 281-310

Fay J.A. (1969) - *The spread of oil slicks on a calm sea.* Oil on the Sea, Plenum Press, NY, pp. 53-63

Fingas, Mervin (1998) - *The evaporation of oil spills: development and implementation of new prediction methodology*. Marine Environmental Modelling Seminar '98, Lillehammer, Norway
Flores H., A. Andreatta, G. Llona, and I. Saavedra (1998) - *Measurements of oil spill spreading in a wave tank using digital image processing.* Oil and hydrocarbon spills, modeling, analysis and control, WIT Press, Southampton, UK, pp.165-173

Huang, J.C., F.C. Monastero (1982) - *Review of the state-of-the-art of oil spill simulation models*. Final Report submitted to the American Petroleum Institute

Leitão, Paulo (1996) - *Modelo de dispersão lagrangeano tridimensional* – dissertação de mestrado, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa

Mackay D., I. A. Buistt, R. Mascarenhas, S. Paterson (1980) - *Oil spill processes and models*. Environment Canada Manuscript Report No. EE-8, Ottawa, Ontario

Mooney, M.(1951) - *The viscosity of a concentrated suspension of spherical particles*, J Colloidal Science, 10, 1951, pp. 162-170

NOAA (1994) - *ADIOS[™]* (Automated Data Inquiry for Oil Spills) user's manual. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut, 50 pp.

NOAA (2000) - *ADIOS[™]* (Automated Data Inquiry for Oil Spills) version 2.0. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut

Payne, J.R., B.E. Kirstein, J.R. Clayton, C. Clary. R. Redding, D. McNabb,
G. Farmer. (1987) - *Integration of Suspended Particulate Matter and Oil Transportation Study.* Final Report, Report to Minerals Management
Service, MMS 87-0083

Proctor, R. ,R.A. Flather, A.J. Elliot (1994) - *Modelling tides and surface drift in the Arabian Gulf – application to the Gulf oil spill.* Continental Shelf Res 14:531-545

Rasmussen, D. (1985) - *Oil Spill Modelling – A tool for cleanup operations*. Proc. 1985 Oil Spill Conference, American Petroleum Institute, 243-249

Reed M. (1989) - *The physical fates component of the natural resource damage assessment model system*. Oil & Chemical Pollution, 5, pp. 99-123

Stiver W., D. Mackay (1984) - *Evaporation rate of spills of hydrocarbons and petroleum mixtures*. Environmental Science and Technology, 18(11), pp. 834-840

12.6 The Water Properties Modules

Leendertsee, J.J. and S.K. Liu (1978) – A three-dimensional turbulent energy model for non-homogeneous estuaries and coastal sea systems. Hydrodynamics of Estuaries and Fjords, J.C.J. Nihoul Ed. Elsevier Publ. Co., Amsterdam, pp. 387-405

UNESCO (1981) - Tenth Report on the joint panel on oceanographic tables and standards. Technical papers in marine science, N. 36, 24 pp

12.7 The Water Quality Module

Arhonditsis, G., Tsirtsis, G., Angelidis, M.O., Karydis, M. (2000) -Quantification of the effects of nonpoint nutrient sources to coastal marine eutrophication: application to a semi-enclosed gulf in the Mediterranean Sea. Ecological Modelling 129:. 209-227

EPA (1985) - Rates, constants, and kinetics formulations in surface water quality modeling (2nd. ed.). United States Environmental Protection Agency, Report EPA/600/3-85/040

Eilers, P.H.C., Peeters, J.C.H. (1988) - A model for the relationship between light intensity and the rate of photosynthesis in phytoplankton. Ecol. Modelling 42: 113-133

Falkowski, P.G.; Wirick, C.D. (1981) - A simulation model of the effects of vertical mixing on primary productivity. Mar Biol 65: 69-75.

Fransz, H.G., J. P. Mommaerts and G. Radach (1991) - Ecological

Modelling of the North Sea. Netherlands Journal of Sea Reserch 28 (1/2): 67-140

Humborg, C., K. Fennel, M. Pastuszak and W .Fennel (2000) - A box model approach for a long-term assessment of estuarine eutrophication, Szczecin Lagoon, southern Baltic. Journal of Marine Systems 25: 387-403

Martins, M. & Dufner, M.J.L., (1982) - Estudo da qualidade da água. Resultados referentes às observações sinópticas em 1980. Estudo Ambiental do Estuário do Tejo (2ªsérie), nº 14. Comissão Nacional do Ambiente, Lisboa, pp.1-212

Nakata, K., F. Horiguchi, M. Yamamuro (2000) - Model study of Lakes Shinji and Nakaumi – a coupled coastal lagoon system. Journal of Marine Systems 26: 145- 169

Napolitano, E. ; Oguz, T.; Malanotte-Rizzoli, P.; Yilmaz, A.; Sansone, E. (2000) - Simulation of biological production in the Rhodes and Ionian basins of the eastern Mediterranean. Journal of Marine Systems 24: 277-298

Neumann, T. (2000) - Towards a 3D-ecosysytem model of the Baltic Sea. Journal of Marine Systems, 25: 405-419

Parsons, T.R.; Takahashi, M. & Hargrave, B. (1984) - Biological oceanographic processes, 3rd. ed., Pergamon Press, Oxford, 330 pp

Pina, P. M. N (2001) – An Integrated Approach to Study the Tagus Estuary Water Quality. Tese de Mestrado, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico

Platt, T.; Galeggos, C.L.; Harrison, W.G. (1980) - Photoinhibition of photosynthesis in natural assemblages of marine phytoplankton. J. Mar. Res. 38 :687-701

Portela, L.(1996) - Modelação matemática de processos hidrodinâmicos e de qualidade da água no Estuário do Tejo. Dissertação para obtenção do grau de Doutor em engenharia do Ambiente.Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa. 240 pp

Rivera, P.C. (1997) - Hydrodynamics, sediment tranport and light extinction off Cape Bolinao, Philippines. PhD Dissertation. A.A.Balkema/Rotterdam/Brookfield

Somlyódy, L., L. Koncsos (1991) - Influence of sediment resuspension on the light conditions and algal growth in lake Balaton. Ecological Modelling, 57: 173-192

Steele, J. H. (1962) Environmental control of photosynthesis in the sea. Limnology and Oceanography, 7: 137-150

Tett, P and H. Wilson (2000) - From biogeochemical to ecological models of marine microplankton. Journal of Marine Systems, 25:431-446

Thornton, K. W. and Lessen, A. S. (1978) - A temperature algorithm for modifying biological rates. Trans. Am. Fish. Soc., 107 (2): 284-287

Valiela, I. (1995) - Marine ecological processes. Springer-Verlag, New York. 686 pp

Vila, X.,Colomer, L.J., Garcia-Gil. (1996) - Modelling spectral irradiance in freshwater in relation to phytoplankton and solar radiation. Ecological Modelling 87: 56-68

12.8 The Surface Module

Brock, T. D. (1981) - Calculating solar radiation for ecological studies. Ecological Modelling Anexo II

Definição da Caixas de Integração

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	1
1. Critérios de Definição	2
1.1. Zonas de Influência das Descargas	2
1.2. Tempo de Permanência da Água	4
2. Caixas de Integração	5

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura II. 1 - Distribuição das partículas emitidas na Ria de Aveiro, após 30 dias de Simulação	3
Figura II. 2 - Delimitação das Zonas de Influência de Descargas.	3
Figura II. 3 - Distribuição das partículas emitidas: Tempo de permanência na Ria de Aveiro	4
Figura II. 4 - Delimitação das Zonas de Igual Tempo de Permanência da Água	5
Figura II. 5 - Caixas de Integração consideradas para a Ria de Aveiro	6

INTRODUÇÃO

O sistema MOHID permite o cálculo da concentração das várias propriedades em estudo, ao longo do tempo, em cada uma das células que constituem a malha. A visualização espacial dos resultados é fundamental para uma correcta caracterização do local em estudo e, neste sentido e como mais uma ferramenta de análise de resultados, o sistema MOHID permite a aplicação do conceito de Caixas de Integração. Em cada uma destas caixas, o modelo determina um valor de concentração, para as propriedades em estudo, que resulta da média dos valores obtidos nas várias células que constituem a caixa. Desta forma, torna-se possível associar às várias zonas do estuário um valor de concentração, caracterizando-as em termos de propriedades ecológicas. A utilização de Caixas de Integração torna, ainda, possível a análise sob o ponto de vista de fluxos de massa entre caixas, que em conjunto com os outros tipos de resultados, permite o estabelecimento de algumas conclusões, ou a verificação de hipóteses, tais como a identificação de zonas predominantemente produtivas ou de transporte, tentando enquadrar cada uma das áreas, no sistema ecológico. Este Anexo apresenta as considerações e os critérios seguidos para a definição de Caixas de Integração adequadas ao estudo da qualidade da água na Ria de Aveiro.

1. Critérios de Definição

Uma Caixa de Integração representa uma zona, para a qual é possível atribuir um único valor de concentração das propriedades em análise, representativo de toda uma área (caixa). Desta forma, pretende-se com a definição das várias caixas, delimitar zonas com características semelhantes, não só em termos ecológicos, mas também em termos físicos. De relatórios anteriores conclui-se que, o sistema ecológico da Ria de Aveiro é fortemente dependente dos processos físicos que nele ocorrem, pelo que se consideram neste estudo dois critérios físicos fundamentais: influência das descargas consideradas e o tempo de permanência da água no interior da Ria. A delimitação das caixas com base nos dois critérios é feita recorrendo a resultados de uma simulação do Modelo Lagrangeno incluído no sistema MOHID. A emissão contínua de partículas (que representam uma massa de água) nas várias células de descarga, distinguidas com uma coloração diferente, permite uma percepção do percurso realizado pela água.

1.1.Zonas de Influência das Descargas

Considera-se a existência de cinco descargas na Ria de Aveiro que correspondem à afluência dos Rios Vouga, Antuã, Caster, Boco e ainda uma entrada de água doce no Canal de Mira (Valas de drenagem). No Anexo III - Quantificação das Descargas na Ria de Aveiro, é feita uma abordagem mais pormenorizada das opções tomadas para a caracterização destas descargas.

Na Figura II. 1 é possível visualizar a distribuição das várias partículas emitidas em cada uma das descargas, após 30 dias de simulação. Cada uma das cores corresponde a uma descarga diferente, pelo que é possível distinguir no interior da Ria a localização das partículas com origem nas várias descarga. A figura permite distinguir claramente as zonas de influência dos rios e ainda delimitar as áreas consideradas de mistura, Figura II. 2.



Figura II. 1 - Distribuição das partículas emitidas na Ria de Aveiro, após 30 dias de Simulação.



Figura II. 2 - Delimitação das Zonas de Influência de Descargas.

1.2. Tempo de Permanência da Água

O tempo de permanência da água no interior da Ria é também uma das formas de visualização dos resultados da simulação efectuada, usando o Modelo Lagrangeano. Neste caso, a coloração das partículas é feita, não pela sua descarga de origem, mas sim pela sua "idade" ao longo da simulação, ou seja, o seu tempo de permanência no interior da Ria, em dias. Decorridos os trinta dias da simulação, observa-se a distribuição de partículas apresentada na figura seguinte, Figura II. 3.



Figura II. 3 - Distribuição das partículas emitidas: Tempo de permanência na Ria de Aveiro.

Pela observação da figura, verifica-se que as partículas mais "velhas" existentes no interior da Ria datam de 10 dias, o que indirectamente indica um tempo de residência da água na ordem dos 10 dias, consistente com os resultados apresentados no relatório principal. É possível identificar zonas onde o tempo de permanência da água é muito baixo, nomeadamente parte da zonas antes identificadas como áreas de influência das descargas, o que seria já esperado, uma vez que se tratam de zonas onde a água é renovada rapidamente pela contínua descarga de água. A zonas com partículas mais

"antigas" podem indicar, por um lado, áreas mais calmas, onde o movimento de água é reduzido, ou por outro lado, zonas onde, apesar de o transporte ser importante, este tem essencialmente um efeito de mistura, mais do que um efeito de expulsão das partículas do interior da ria.

Mais uma vez é possível estabelecer, qualitativamente, a delimitação de zonas, de acordo com a permanência das partículas no seu interior, Figura II. 4.



Figura II. 4 - Delimitação das Zonas de Igual Tempo de Permanência da Água

2. Caixas de Integração

Da análise das figuras anteriores, tentando de uma forma qualitativa integrar os critérios de delimitação considerados, surge a figura seguinte, Figura II. 5, que divide a Ria de Aveiro em dez zonas.



Figura II. 5 - Caixas de Integração consideradas para a Ria de Aveiro

As caixas 1,3,4,7,8 são caixas onde existe uma descarga e por essa razão serão zonas onde a qualidade da água será, à partida, extremamente influenciada pelas condições impostas na descarga. As caixas 2 e 6 correspondem a zonas onde a mistura é bastante acentuada. Por último, consideram-se as caixas 5, 9 e 10, que constituem o canal principal, onde o transporte tem uma componente muito importante.

Anexo III

Quantificação das Descargas na Ria de Aveiro

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	1
1. Descrição Geral das Descargas	2
2. Canal Principal ou Espinheiro	3
2.1. Caudal	4
2.2. Propriedades da Água	7
3. Canal da Murtosa	16
3.1. Caudal	16
3.2. Propriedades da Água	19
4. Canal de S. Jacinto/Ovar	22
4.1. Caudal	22
4.2. Propriedades da Água	23
5. Canal de Ílhavo	24
5.1. Caudal	24
5.2. Propriedades da Água	24
6. Canal de Mira	25
6.1. Caudal	25
6.2. Propriedades da Água	25
APÊNDICE	27

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura III. 1 - Canais presentes na Ria de Aveiro	2
Figura III. 2 - Bacia Hidrográfica do Rio Vouga; Estação de Amostragem Ponte de Águeda	4
Figura III. 3 - Análise Estatística dos valores de Caudal do Rio Vouga	
Figura III. 4 - Série de Valores de Caudal Médio Diário do Rio Vouga entre 1978 e 1988	6
Figura III. 5 - Variação Sazonal da descarga do Rio Vouga	7
Figura III. 6 - Variação estimada para a concentração das cargas poluentes com o caudal	
Figura III. 7 - Registos de Fitoplâncton da Estação de Amostragem de Ponte de Águeda	
Figura III. 8 - Registos de Amónia na Estação de Amostragem de Ponte de Águeda	
Figura III. 9 - Registos de Nitrato na Estação de Amostragem de Ponte de Águeda	
Figura III. 10 - Análise Estatística da Concentração de Fitoplâncton no Rio Vouga	13
Figura III. 11 - Análise Estatística da Concentração de Amónia no Rio Vouga	
Figura III. 12 - Análise Estatística da Concentração de Nitrato no Rio Vouga	
Figura III. 13 - Análise Estatística da Concentração de Nitrito no Rio Vouga	
Figura III. 14 - Análise Estatística da Concentração de Matéria em Suspensão no Rio Vouga	
Figura III. 15 - Bacia Hidrográfica do Rio Antuã; Estação de Amostragem da Pt. Minhoteira	
Figura III. 16 - Análise Estatística dos valores de Caudal do Rio Antuã	
Figura III. 17 - Série de Valores de Caudal Médio Diário do Rio Antuã entre 1978 e 1990	
Figura III. 18 - Variação Sazonal da descarga do Rio Antuã	
Figura III. 19 - Análise Estatística da Concentração de Fitoplâncton no Rio Antuã	19
Figura III. 20 - Análise Estatística da Concentração de Amónia no Rio Antuã	
Figura III. 21 - Análise Estatística da Concentração de Nitrato no Rio Antuã	
Figura III. 22 - Análise Estatística da Concentração de Nitrito no Rio Antuã	
Figura III. 23 - Análise Estatística da Concentração de Matéria em Suspensão no Rio Antuã	
Figura III. 24 - Variação Sazonal da descarga do Rio Caster	
Figura III. 25 - Variação Sazonal da descarga do Rio Boco	
Figura III. 26 - Bacias de Drenagem existentes na Ria de Aveiro	
Figura III. 27 - Bacias de Drenagem das Estações de Amostragem Consideradas	

Anexo III

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela III. 1 -Entradas de Água Doce Existentes em cada Canal da Ria de Aveiro	2
Tabela III. 2 - Principais considerações para a quantificação das descargas dos rios	10
Tabela III. 3 - Quantificação da descarga do Rio Vouga	15
Tabela III. 4 - Quantificação da descarga do Rio Antuã	22
Tabela III. 5 - Quantificação da descarga do Rio Caster	23
Tabela III. 6 - Quantificação da descarga do Rio Boco	25
Tabela III. 7 - Quantificação da descarga das Valas de Drenagem no Canal de Mira	26
Tabela III. 8 - Áreas de Drenagem determinadas para a Ria de Aveiro	29
Tabela III. 9 - Áreas de Drenagem associadas às Estações de Amostragem	29

INTRODUÇÃO

A quantificação das descargas localizadas na Ria de Aveiro constitui uma das etapas fundamentais para a construção de uma simulação que permita atingir os objectivos pretendidos no estudo. Pretende-se neste anexo descrever de forma mais pormenorizada as principais considerações e opções tomadas no sentido de definir as características das descargas na Ria de Aveiro a utilizar na simulação do modelo, em particular nas descargas dos rios Vouga e Antuã. As descargas são caracterizadas em termos de caudal e concentração de algumas propriedades da água: *Fitoplâncton*, Nitrato (NO₃⁻), Nitrito (NO₂²⁻), Matéria em Suspensão, Amónia (NH₄⁺) e as três formas de Azoto Orgânico, Azoto orgânico Dissolvido Refractário e Não Refractário e Azoto Orgânico Particulado.

Apresenta-se ainda em Apêndice a determinação das áreas de drenagem utilizadas na caracterização das descargas, determinadas utilizando uma ferramenta de Sistemas de Informação Geográfica – ArcView.

1. Descrição Geral das Descargas

A Figura III. 1, já apresentada no relatório principal, permite distinguir os canais constituintes da Ria de Aveiro.



Figura III. 1 - Canais presentes na Ria de Aveiro

Em cada um destes canais existem algumas descargas de água doce, sintetizadas na Tabela III. 1.

Localização da Descarga	Entradas de Água Doce
Canal Principal ou Espinheiro	Rio Vouga
Canal da Mutosa	Rio Antuã ETAR de Estarreja
Canal de S. Jacinto/Ovar	Rio Caster ETAR de Ovar
Canal de Ilhavo	Rio Boco ETAR de Ílhavo ETAR de Aveiro
Canal de Mira	Conjunto de Valas de Drenagem ETAR de Costa Nova

Tabela III. 1 -Entradas de Água Doce Existentes em cada Canal da Ria de Aveiro

A região envolvente da Ria de Aveiro é caracterizada não só pela grande quantidade e indústrias, e seus efluentes, mas também por uma actividade agrícola e pecuária bastante intensa pelo que na realidade a tabela anterior não inclui a totalidade das descargas na região da Ria de Aveiro. Relativamente às ETAR's, o relatório de progresso anterior apresenta uma quantificação da contribuição destas descargas em termos de população servida, no entanto, opta-se por não considerar as descargas relativas a estes efluentes, uma vez que apenas representam as águas residuais de cerca de 10% da população, sendo a sua contribuição em termos de caudal total afluente à Ria de Aveiro pouco significativa, da ordem dos 0.5%. Por não existir informação detalhada quanto à quantidade e qualidade de todos os efluentes descarregados na Ria de Aveiro (agrícolas, pecuários, industriais e urbanos) opta-se por desenvolver este estudo considerando apenas as descargas dos rios. Esta aproximação não invalida, contudo, o cumprimento do objectivo inicial que consiste no estudo dos processos hidrodinâmicos e ecológicos na Ria de Aveiro.

2. Canal Principal ou Espinheiro

A caracterização da descarga do Rio Vouga é feita a partir dos dados existentes para um dos principais afluentes deste rio, junto com algumas considerações, pelo facto de não existir uma estação de amostragem que permita quantificar directamente a descarga deste rio.

A bacia hidrográfica do Rio Vouga, com uma área total de drenagem de cerca de 3300 Km² (a determinação deste valor encontra-se descrita no Apêndice deste Anexo), possui três afluentes principais: Rio Águeda, Rio Cértima e o Rio Caima, cujas bacias estão representadas na Figura III. 2.

A rede de amostragem do INAG possui uma estação de amostragem, Figura III. 2, localizada na Ponte de Águeda, de código 10 G/02, que permite quantificar a descarga deste rio, em termos de caudal e de algumas propriedades da água.

Anexo III



Figura III. 2 - Bacia Hidrográfica do Rio Vouga; Estação de Amostragem Ponte de Águeda

2.1.Caudal

Considerando que a bacia hidrográfica do Rio Águeda (com cerca de 400 Km²) é representativa de toda a bacia do Rio Vouga, ou seja, que são semelhantes algumas características, tais como ocupação do solo (áreas agrícolas e aglomerados populacionais), tipo de solo e topografia, opta-se por considerar o valor de caudal do Rio Águeda como uma base de extrapolação para toda a bacia do Vouga. Admite-se a existência de uma relação proporcional entre a área da bacia hidrográfica e o volume de água drenado para o leito do rio. Nestas condições, o valor de caudal médio anual do Rio Vouga é de 60 m³/s (valor resultante da extrapolação partindo do valor obtido por média aritmética da série de 54 anos de registos da estação). Este é um valor um pouco superior relativamente ao valor de 51 m³/s apresentado no relatório de progresso, mas considera-se um valor satisfatório e, de certa forma, poderá indicar a validade das aproximações e considerações utilizadas. O caudal do Rio Vouga apresenta, ao longo da série temporal de registos, uma gama bastante alargada de valores, podendo variar entre 0.06 e 1240 m³/s. Esta variação encontra-se representada na Figura III. 3, na forma de uma distribuição de frequências de ocorrência de caudal.



Figura III. 3 - Análise Estatística dos valores de Caudal do Rio Vouga

A análise da figura anterior permite concluir que o valor de 60 m³/s determinado para o caudal do Rio Vouga, apesar de corresponder ao valor médio dos registos, não se encontra na classe de valores com percentagem de frequência mais elevada (entre 10 e 20 m³/s). Pelo contrário, encontra-se numa classe que apenas corresponde a cerca de 5-10% das ocorrências durante os 54 anos de registos. O valor médio encontrado não deverá, desta forma ser considerado característico da descarga, no sentido de poder permitir simular uma situação considerada mais frequente, ou mais característica. Ainda da análise da série temporal de registos é possível determinar, tendo em conta as frequências acumuladas (representadas na figura por uma curva), o valor mediano de 18 m³/s, correspondente ao Percentil 50. Este dado permite afirmar que, 50% dos valores da série temporal se encontram abaixo de 18 m³/s e, naturalmente, os restantes 50% estarão acima deste valor. Desta forma, o Percentil 50 talvez represente melhor a ocorrência de caudal no Rio Vouga numa situação genérica, mas talvez a principal conclusão, da discrepância de valores, seja a confirmação de que o caudal do Rio Vouga apresenta uma variação muito significativa ao longo de todos estes anos de registo, apresentando valores muito reduzidos e valores elevados.

No sentido de permitir uma melhor visualização, a Figura III. 4 representa o valor de caudal encontrado para o Rio Vouga ao longo dos últimos 11 anos de registo (não sendo apresentados os anteriores apenas por uma questão de simplificação). Note-se



que não se encontram disponíveis os registos correspondentes ao ano de 1987.

Figura III. 4 - Série de Valores de Caudal Médio Diário do Rio Vouga entre 1978 e 1988

Verifica-se, por um lado, uma significativa variação de valores ao longo dos vários anos, com anos francamente mais húmidos que outros mas, por outro lado, a variação sazonal da descarga é também considerável. A análise do gráfico sugere no início de cada ano a existência de um aumento de caudal, verificado em praticamente todos os anos de registos, e, da mesma forma, um aumento de intensidade no final do ano. Assim, conclui-se que a descarga do Rio Vouga não deve ser caracterizada apenas por um único valor, durante todo o ano, dada a grande variação sazonal da descarga. No entanto, como foi referido no relatório principal, no caso da Ria de Aveiro, simular uma descarga com uma variação diária ao longo do ano, implicaria um cálculo em simultâneo das condições hidrodinâmicas e da qualidade da água o que, em termos de tempo de cálculo seria incomportável. No sentido de ser eficientemente possível simular os processos ecológicos durante um ano é utilizado um ficheiro hidrodinâmico construído a partir de valores constantes das descargas na Ria de Aveiro. Dada esta limitação, considera-se, neste estudo, uma variação sazonal por fases, ou etapas, utilizando ficheiros hidrodinâmicos diferentes de forma a simular, o mais aproximado possível, a variação sazonal da descarga. A figura seguinte, Figura III. 5, também já apresentada no relatório principal, apresenta por um lado, a variação do valor mediano correspondente a cada mês do ano determinado, tendo em conta todos os dados dos registos, e por outro lado, a aproximação considerada para



permitir a utilização de ficheiros hidrodinâmicos.

Figura III. 5 - Variação Sazonal da descarga do Rio Vouga

Desta forma é possível simular a variação sazonal da descarga do Rio Vouga utilizando três ficheiros hidrodinâmicos com valores de 60, $35 e 10 m^3/s$.

2.2. Propriedades da Água

Relativamente à concentração das propriedades da água relevantes para este estudo opta-se, também por recorrer ao tratamento dos registos da estação de amostragem de Ponte de Águeda, ao invés de utilizar aqueles que se encontram descritos no relatório de progresso (resultantes das campanhas efectuadas no âmbito do projecto), por se considerar que devido a um maior número de registos do INAG, os valores característicos serão mais representativos. Os resultados das campanhas serão utilizados para posterior comparação com os resultados obtidos pelo modelo no sentido da sua validação.

As cargas poluentes presentes nas descargas dos Rios podem, de uma maneira geral, ter dois tipos de origem: pontual ou difusa. Como fontes de poluição pontual podem considerar-se as emissões de efluentes resultantes de actividade humana directa, isto é, efluentes domésticos ou industriais. Por outro lado, os efluentes que resultam das operações de rega de terrenos agrícolas e de escorrência das águas da chuva através

dos mesmos, podem provocar a sua lixiviação, dissolvendo muitos nutrientes utilizados como adubo nesta prática, sendo considerados como fontes difusas de nutrientes. Em alguns casos, é possível de forma aproximada estabelecer uma relação entre as cargas poluentes e o valor de caudal do Rio sendo, no entanto, essa relação diferente, dependendo do tipo de origem da carga. As fontes pontuais de nutrientes são à partida independentes do caudal, ou seja, a sua quantificação é apenas dependente da actividade humana e não do meio que servirá de receptor a esse efluente. Desta forma, espera-se que a sua variação seja inversa à variação do caudal: a um maior caudal do Rio corresponderá uma maior diluição da carga da fonte pontual, o que se reflecte numa diminuição da concentração. Quanto às fontes difusas, a relação não será tão intuitiva, no entanto, uma vez que depende da quantidade de água disponível para a lixiviação dos campos, quanto maior a precipitação, e associado a esta, maior caudal do Rio, pode esperar-se uma maior concentração do poluente no Rio, embora esta relação não seja, de todo, linear. Consideradas como válidas estas relações, a concentração do poluente, ou nutriente, total no Rio será dada pela soma destas duas componentes que, a ser correcto todo o raciocínio anterior corresponde a ter um valor dependente do caudal do rio, o que em termos gráficos corresponderia a uma situação do tipo da representada na Figura III. 6.



Figura III. 6 - Variação estimada para a concentração das cargas poluentes com o caudal

A situação ideal seria a determinação desta relação partindo de registos no Rio Vouga. Mais uma vez, recorrendo à consideração de que a bacia do Rio Vouga é hidrológica, topográfica e espacialmente semelhante à bacia do Rio Águeda, pode admitir-se que as concentrações encontradas nesta última, correspondem aproximadamente às concentrações do próprio Rio Vouga. No entanto, uma vez que os registos de caudal e concentrações do INAG não coincidem no tempo não será possível encontrar tal relação. Os registos de caudal iniciam no ano de 1934 e terminam no ano 1988, enquanto que os registos de qualidade da água têm início no ano de 1989 e terminam no ano de 2001. Desta forma, não sendo possível atribuir os valores de concentração correspondentes aos caudais a simular a solução passa por identificar, à semelhança do tratamento de caudal descrito, os valores medianos da descarga.

A estação de amostragem de Ponte de Águeda possui registos de algumas das propriedades necessárias para a simulação tais como *Clorofila_a* (68 valores), do qual é possível determinar a concentração de *Fitoplâncton* correspondente, Amónia (131 valores), Nitrito (75 valores), Nitrato (122 valores) e Matéria em Suspensão (126 valores). A concentração de Azoto Orgânico Total é determinada recorrendo aos valores registados nas campanhas efectuadas pelo grupo de trabalho coordenado por José Figueiredo da Silva, no âmbito deste projecto (Inventário de Nutrientes), apresentado no relatório de progresso com 8 registos efectuados durante o ano de 2000 na Estação do Vouga em S.J. Loure. O valor de Norgânico apresentado foi determinado pelo Método Kjeldhal, pelo que corresponde às concentrações de Amónia e Azoto Orgânico Total presente na amostra, sendo possível então, calcular a propriedade em questão. A distinção entre Azoto Orgânico Dissolvido Refractário, Não Refractário e Particulado é feita à custa de considerações encontradas na literatura. A Tabela III. 2 resume as considerações assumidas para a determinação das propriedades necessárias à simulação.

Designação	Unidades	Origem
Fitoplâncton	mg C/L	Registos de Clorofila-a na Estação de Amostragem (cada mg deste pigmento

		corresponde a 60 mg de Carbono de Fitoplâncton segundo Portela, 1996)
Amónia	mg N / L	Valor Mediano da Série de Registos da Estação de Amostragem, correspondente à propriedade Azoto Amoniacal
Nitrato	mg N / L	Valor Mediano da Série de Registos da Estação de Amostragem
Nitrito	mg N / L	Valor Mediano da Série de Registos da Estação de Amostragem
Matéria em Suspensão	mg / L	Valor Mediano da Série de Registos da Estação de Amostragem
Azoto Orgânico Total	mg N / L	Valor Mediano dos Registos de Azoto Kjeldhal das Campanhas do Model Ria durante o ano de 2000
Azoto Orgânico Dissolvido Não Refractário	mg N / L	Considerado como 35% do Azoto Orgânico Total
Azoto Orgânico Dissolvido Refractário	mg N / L	Considerado como 15% do Azoto Orgânico Total
Azoto Orgânico Particulado	mg N / L	Considerado como 50% do Azoto Orgânico Total

Tabela III. 2 - Principais considerações para a quantificação das descargas dos rios

As figuras seguintes, permitem visualizar os registos na estação de amostragem para algumas propriedades, distribuídos pelos vários meses do ano de forma a detectar possíveis tendências para a existência de variações sazonais. São ainda apresentadas variações correspondentes aos valores médio e mediano, determinados para cada mês do ano.



Figura III. 7 - Registos de Fitoplâncton da Estação de Amostragem de Ponte de Águeda

A Figura III. 7, referente ao *Fitoplâncton* parece indicar um aumento de concentração durante os meses de Julho, Agosto e Setembro. No entanto, dado o reduzido número de registos e a grande variação da concentração indicada pelos registos, não é possível atribuir um valor mais característico, ou mesmo um valor mais frequente durante esses meses. Durante os restantes meses do ano as concentrações apresentam algumas variações, mas não se consideram muito significativas.



Figura III. 8 - Registos de Amónia na Estação de Amostragem de Ponte de Águeda

A variação da concentração de Amónia na descarga do Rio Vouga não parece, atendendo à Figura III. 8, apresentar uma variação sazonal significativa. A existência de alguns valores nitidamente afastados da tendência, poderão indicar algumas situações esporádicas, dado o reduzido número de ocorrências, pelo que se considera neste estudo que, à semelhança do *Fitoplâncton*, a melhor opção prende-se com a atribuição de um valor constante para a concentração de Amónia na descarga do Rio Vouga.



Figura III. 9 - Registos de Nitrato na Estação de Amostragem de Ponte de Águeda

Relativamente aos valores de concentração de Nitrato registados na estação de amostragem, Figura III. 9, apresenta uma distribuição um tanto dispersa, não sendo possível identificar uma variação sazonal característica, pelo que também para o Nitrato será atribuído um único valor de concentração constante ao longo do ano.

A atribuição de um único valor de concentração das propriedades é feita recorrendo à distribuição estatística dos valores registados na estação de amostragem. As figuras seguintes representam as frequências de amostragem dos valores da série temporal de registo para as concentrações de *Fitoplâncton*, Amónia, Nitrato, Nitrito e Matéria em Suspensão.



Figura III. 10 - Análise Estatística da Concentração de Fitoplâncton no Rio Vouga

A concentração de *Fitoplâncton* varia, segundo os registos, entre 0.1 e 2 mg C/L. Atendendo à figura anterior considera-se como característico da descarga do Rio Vouga o valor de 0.15 mg C/L para a concentração de *Fitoplâncton*, por se tratar do valor médio da classe 0.1-0.2 à qual corresponde um maior número de ocorrências, cerca de 25% dos registos.

Quanto à concentração de Amónia não existe uma classe que possa ser considerada a mais frequente, Figura III. 11, e neste sentido opta-se por assumir o valor dado pelo Percentil 50, como o valor característico da descarga, ou seja, 0.09 mg N/L.



Figura III. 11 - Análise Estatística da Concentração de Amónia no Rio Vouga

Também para as concentrações de Nitrato, Nitrito e Matéria em Suspensão, cujas figuras se encontram de seguida, opta-se por considerar os respectivos valores de Percentil 50, respectivamente 0.68, 0.02, 12.5 mg /L, uma vez que não existe uma classe com uma frequência significativamente maior que as restantes.



Figura III. 12 - Análise Estatística da Concentração de Nitrato no Rio Vouga



Figura III. 13 - Análise Estatística da Concentração de Nitrito no Rio Vouga



Figura III. 14 - Análise Estatística da Concentração de Matéria em Suspensão no Rio Vouga

Relativamente às várias espécies de Azoto Orgânico são atribuídos a esta descarga os valores resultantes da considerações já descritas anteriormente aplicadas ao valor médio de Norgânico registado nas campanhas.

A Tabela III. 3, já apresentada no relatório principal, resume os valores considerados para as concentrações das diferentes propriedades da água em estudo na descarga do Rio Vouga.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,15
Amónia (mg N / L)	0,09
Nitrato (mg N / L)	0,68
Nitrito (mg N / L)	0,02
Matéria em Suspensão (mg / L)	12,50
DONnr (mg N / L)	0,23
DONr (mg N / L)	0,1
PON (mg N / L)	0,34

Tabela III. 3 - Quantificação da descarga do Rio Vouga

3. Canal da Murtosa

A quantificação da descarga do Rio Antuã, em termos de caudal e de concentração das propriedades da água é feita recorrendo aos valores registados na estação de amostragem de Ponte da Minhoteira, código 09/F01, da rede de amostragem do INAG, Figura III. 15.



Figura III. 15 - Bacia Hidrográfica do Rio Antuã; Estação de Amostragem da Pt. Minhoteira

3.1.Caudal

A bacia de drenagem caracterizada pela estação de amostragem da Ponte da Minhoteira corresponde a cerca de 115 Km², enquanto que toda a bacia do Rio Antuã resulta da drenagem de cerca de 256 Km² (no apêndice deste anexo apresenta-se o procedimento de determinação destes valores de área). À semelhança do Rio Vouga, considerando que a bacia de Ponte da Minhoteira é representativa de toda a bacia hidrográfica do Rio Antuã, assume-se a existência de uma relação proporcional entre a área da bacia hidrográfica e o caudal transportado pelo rio. A Figura III. 16 representa a distribuição de ocorrências de caudal na descarga do Rio Antuã.



Figura III. 16 - Análise Estatística dos valores de Caudal do Rio Antuã

Verifica-se na classe 5-10 m³/s uma maior frequência de valores, com cerca de 25% dos valores registados inseridos entre estes valores. O valor médio, resultante da média aritmética de todos os valores da série de registos, é de 9 m³/s e o valor do Percentil 50 corresponde a 5 m³/s, também incluídos nessa classe. O valor indicado no relatório de progresso é de 5 m³/s, o que torna as aproximações bastante válidas. A proximidade dos valores calculados, estatisticamente sugere que a descarga do Rio Antuã apresenta, relativamente à descarga do Rio Vouga, uma variação bastante menor de valor de caudal registado.

A Figura III. 17 representa todos os valores determinados a partir dos registos da estação de amostragem, entre os anos de 1978 e 1990, e verifica-se que, à semelhança da descarga do Rio Vouga, existe uma variação sazonal de caudal relativamente bem definida, evidenciando um aumento nos primeiros e últimos meses do ano. Verifica-se, também, que existe alguma variação inter-anual entre diferentes anos. Apenas como curiosidade pode dizer-se que o ano de 1982, que apresenta um valor de caudal muito elevado, relativamente aos outros, não terá sido um ano particularmente chuvoso uma vez que na Figura III. 5, referente à série de valores da descarga do Rio Vouga, este é um dos anos com menor caudal. Assim, o valor registado poderá sugerir a presença de uma descarga esporádica efectuada neste rio, durante este ano.



Figura III. 17 - Série de Valores de Caudal Médio Diário do Rio Antuã entre 1978 e 1990

A variação sazonal considerada na simulação encontra-se representada na Figura III. 18, ajustada à variação do valor mediano mensal calculado a partir dos registos da estação de amostragem.



Figura III. 18 - Variação Sazonal da descarga do Rio Antuã

Os três ficheiros hidrodinâmicos são construídos com uma descarga de 12, 8 e 2 m^3/s , respectivamente, correspondentes à descarga do Rio Antuã.

3.2. Propriedades da Água

A quantificação da descarga do Rio Antuã, em termos da concentração de propriedades é feita, utilizando a mesma metodologia aplicada ao Rio Vouga, ou seja, com base nos registos da estação de amostragem e assumindo as considerações da Tabela III. 2, apresentada anteriormente. As figuras seguintes dizem respeito à distribuição dos valores dos registos da estação de amostragem por ocorrências para as várias propriedades da qualidade da água consideradas.



Figura III. 19 - Análise Estatística da Concentração de Fitoplâncton no Rio Antuã

A Figura III. 19 permite identificar a gama de valores mais frequente para a concentração de *Fitoplâncton* na descarga do Rio Antuã, entre 0.1 e 0.2 mg C/L, com uma ocorrência de cerca de 30%. O valor de Percentil 50 encontra-se também nesta gama, apresentando um valor de 0.12 mg C/L, que é o valor considerado para a descarga do Rio Antuã.



Para a concentração de Amónia não é possível identificar uma classe com valores de frequências significativamente maiores que as restantes. O valor de Percentil 50

determinado é de 0.14 mg N/L.



A concentração de Nitrato na descarga do Rio Antuã possui uma variação bastante significativa, entre os 0.1 e os 7.5 mg N/L. O valor mediano da distribuição é de 2.3 mg N/L, localizado na classe que possui maior número de ocorrências, com cerca de 15 % dos valores registados. A figura seguinte, Figura III. 22 corresponde à distribuição de frequências da concentração de Nitrito, para a qual o valor mediano é

de 0.19 mg N/L.


Figura III. 22 - Análise Estatística da Concentração de Nitrito no Rio Antuã

Por último, a Figura III. 23 permite observar a distribuição de Matéria em Suspensão registada na estação de amostragem, com valores que variam desde os 10 até 400 mg/L. Os valores mais frequentes são, no entanto, mais baixos. Cerca de 90% dos registos apresentam valores inferiores a 50 mg/L. O valor mediano da série de registos é de 20.7, localizado sobre uma das classes com maiores ocorrências.



Figura III. 23 - Análise Estatística da Concentração de Matéria em Suspensão no Rio Antuã

A Tabela III. 4 apresenta os valores considerados característicos da descarga do Rio Antuã ao longo do ano, já apresentada no relatório principal.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,12
Amónia (mg N / L)	0,14
Nitrato (mg N / L)	2,30
Nitrito (mg N / L)	0,19
Matéria em Suspensão (mg / L)	20,7
DONnr (mg N / L)	0,25
DONr (mg N / L)	0,11
PON (mg N / L)	0,36

Tabela III. 4 - Quantificação da descarga do Rio Antuã

4. Canal de S. Jacinto/Ovar

4.1.Caudal

A bacia do Rio Caster não possui uma estação de amostragem que possa ser representativa da sua descarga e deste modo, opta-se por utilizar os valores de caudal registados na estação de Ponte da Minhoteira por ser aquela que se situa a menor distância, sendo por isso aquela cuja bacia de drenagem poderá apresentar mais semelhanças relativamente à bacia do Rio Caster. Mais uma vez, considera-se a existência de uma relação proporcional entre o caudal do rio e a área da bacia hidrográfica associada. A bacia correspondente ao Rio Caster tem uma área de drenagem de, aproximadamente, 211 Km², cuja determinação se encontra em apêndice.

A Figura III. 24 apresenta a variação sazonal da descarga do Rio Caster considerada na simulação, face aos valores medianos mensais determinados a partir dos registos da estação de amostragem.



Figura III. 24 - Variação Sazonal da descarga do Rio Caster

4.2. Propriedades da Água

Os valores de concentração das propriedades da água, apresentados na Tabela III. 5, foram determinados com base no valor médio dos registos das campanhas do projecto *ModelRia* realizadas durante o ano de 2000 e cujos resultados foram apresentados no relatório de progresso.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,15
Amónia (mg N / L)	1,32
Nitrato (mg N / L)	5,84
Nitrito (mg N / L)	0,58
Matéria em Suspensão (mg / L)	16,60
DONnr (mg N / L)	0,13
DONr (mg N / L)	0,05
PON (mg N / L)	0,18

Tabela III. 5 - Quantificação da descarga do Rio Caster

5. Canal de Ílhavo

5.1.Caudal

À semelhança da análise efectuada para o Rio Caster, os valores de caudal característicos do Rio Boco são determinados com base nos registos de uma estação de amostragem localizada, não na bacia de drenagem, mas nas suas proximidades. Neste caso, a estação de Ponte de Águeda é aquela que mais se aproxima da bacia hidrográfica do Rio Boco pelo que os registos desta estação são considerados representativos da sua bacia de drenagem, admitindo que as bacias são semelhantes e que o Rio Boco tem uma área de drenagem com 205 km². A Figura III. 25 apresenta os valores medianos mensais calculados para o caudal do Rio Boco, nestas condições e ainda os valores de caudal considerados para as quatro fases de simulação.



Figura III. 25 - Variação Sazonal da descarga do Rio Boco

5.2. Propriedades da Água

A Tabela III. 6 apresenta os valores referentes às concentrações das diversas propriedades descarregadas pelo Rio Boco na Ria de Aveiro. Os valores foram determinados tendo por base os registos das campanhas do *ModelRia*.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,15
Amónia (mg N / L)	0,04
Nitrato (mg N / L)	3,31
Nitrito (mg N / L)	0,33
Matéria em Suspensão (mg / L)	22,20
DONnr (mg N / L)	0,72
DONr (mg N / L)	0,31
PON (mg N / L)	1,03

Tabela III. 6 - Quantificação da descarga do Rio Boco

6. Canal de Mira

6.1.Caudal

O caudal descarregado pelas Valas de Drenagem no Canal de Mira possui, segundo relatório de progresso, um valor de 3 m³/s. Repetindo um pouco o referido no relatório principal, considera-se que esta descarga não possui uma variação sazonal semelhante à variação das restantes descargas, por ser uma descarga artificial, não resultando apenas da escorrência de água da chuva. Desta forma o valor de 3 m³/s é mantido constante durante todas as fases da simulação.

6.2. Propriedades da Água

As propriedades da água consideradas na simulação apresentam-se na Tabela III. 7, resultante dos resultados das campanhas realizadas no âmbito deste projecto.

Propriedade	Valor Considerado
Fitoplâncton (mg C / L)	0,46
Amónia (mg N / L)	0,23
Nitrato (mg N / L)	1,83
Nitrito (mg N / L)	0,18
Matéria em Suspensão (mg / L)	16,10
DONnr (mg N / L)	0,39
DONr (mg N / L)	0,17
PON (mg N / L)	0,56

Tabela III. 7 - Quantificação da descarga das Valas de Drenagem no Canal de Mira

APÊNDICE

Determinação das Áreas de Drenagem

A determinação das características de cada uma das descargas na Ria de Aveiro é feita tendo em conta as áreas das bacias de drenagem dos rios e estações de amostragem consideradas. No sentido de normalizar os critérios de definição das áreas de drenagem, optou-se por determinar as mesmas recorrendo a uma ferramenta de Sistemas de Informação Geográfica – ArcView.

Partindo de mapas do Atlas do Ambiente, disponíveis em versão digital, contendo informação sobre as linhas de água existentes em Portugal, é possível delinear as bacias hidrográficas dos rios em estudo, utilizando o ArcView. A Figura III. 26 permite visualizar o resultado da definição das bacias hidrográficas. Note-se que apesar de se encontrar definida uma área correspondente ao Canal de Mira esta não foi considerada neste estudo para efeitos de cálculo de caudais. Na realidade a descarga existente no Canal de Mira é constituída por algumas Valas de Drenagem, artificiais cujo regime de caudais será mais dependente da frequência de rega praticada nos campos agrícolas envolventes, do que propriamente pelo regime de escorrências da água da chuva. A apresenta os resultados obtidos através do software.



Figura III. 26 - Bacias de Drenagem existentes na Ria de Aveiro.

Rio Vouga	2440 Km ²
Rio Antuã	256 Km ²
Rio Caster	211 Km ²
Rio Boco	205 Km ²
Canal de Mira	372 Km ²

Tabela III. 8 - Áreas de Drenagem determinadas para a Ria de Aveiro

A Figura III. 27apresenta as áreas de drenagem associadas a cada uma das estações de amostragem consideradas. Considera-se neste estudo que os registos das estações se referem às características das escorrências das águas da chuva através destas áreas, pelo que a determinação do caudal total dos rios é feita recorrendo a uma relação proporcional entre a área da bacia de drenagem e o caudal do rio. Na Tabela III. 9encontram-se os valores de área determinados através do ArcView.



Figura III. 27 - Bacias de Drenagem das Estações de Amostragem Consideradas

Estação de Ponte de Águeda	400 Km ²
Estação de Ponte da Minhoteira	115 Km ²

Tabela III. 9 - Áreas de Drenagem associadas às Estações de Amostragem