



20 e 21 de outubro
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE
São José dos Campos - SP

Nova Versão para o Modelo LAMBDA

Fabiana F. Paes¹, Haroldo F. Campos Velho², Fernando M. Ramos²

¹Curso de pós graduação em Computação Aplicada - Instituto Nacional de Pesquisas
(INPE)

Caixa Postal 515 – 91.501-970 – São José dos Campos – SP – Brazil

²Departamento de Computação e Matemática Aplicada – Instituto Nacional de
Pesquisas (INPE).

{fabiana.paes,haroldo,fernando}@lac.inpe.br

Abstract. *The Lagrangian stochastic dispersion model LAMBDA was developed to study the processes of transport and diffusion of pollutants over a flat terrain. The model emits about 1000 computational particles (fictitious particles) at each time to simulate the atmospheric movements proved by evidence of fluid or contaminants released into the atmosphere. In this work, changes and adaptations in the LAMBDA model are made to use any size domain and thus simulate the movement of particles in actual areas and as an example, we present the trajectories of 10 particles at each computational time step in the areas studied.*

Resumo. *O modelo de dispersão estocástico Lagrangeano LAMBDA foi desenvolvido para estudar os processos de transporte e difusão de poluentes sobre um terreno plano. O modelo emite cerca de 1000 partículas computacionais (partículas fictícias) a cada passo de tempo, para simular os movimentos atmosféricos provados por elementos de fluido ou contaminantes liberados na atmosfera. Neste trabalho, alterações e adaptações no modelo LAMBDA são feitas para utilizar qualquer dimensão de domínio e assim, simular o movimento das partículas em áreas reais e como exemplo, apresentamos as trajetórias de 10 partículas computacionais a cada passo de tempo nos domínios estudados.*

1. Introdução

A atmosfera do planeta é uma exceção na medida em que é um dos raros recursos naturais que é compartilhado pelo mundo inteiro e assim os efeitos negativos sobre esta são globalmente sentidos. E levando em consideração os problemas que advêm da atmosfera representar perigo para os organismos, estudos sobre o efeito estufa estão em desenvolvimentos, pois as conseqüências são sentidas tanto a nível global como a regional, afetando um pouco por toda parte os vários países. O aquecimento global pode levar à ocorrência de variações climáticas tais como: alteração na precipitação, subida

do nível dos oceanos (degelos) e ondas de calor. Assim é natural registrar um aumento de situações de cheias que conseqüentemente irá aumentar os índices de mortalidade no planeta Terra. Uma profunda alteração do clima terá uma influência desastrosa nas sociedades afetando a produção agrícola e as reservas de água, dando origem a alterações econômicas e sociais.

A maior parte dos gases de estufa tem fontes naturais, além das fontes antropogênicas, contudo existem potentes mecanismos naturais para removê-los da atmosfera. Porém, o contínuo crescimento das concentrações destes gases na atmosfera dá origem a que mais gases sejam emitidos do que removidos em cada ano.

A adoção de um modelo de transporte e difusão Euleriano ou Lagrangiano constitui a base do que se convencionou problema direto em física da atmosfera. Nestas condições pode-se dizer que dada às causas (posição e intensidade das fontes/sumidouro, propriedade do escoamento e do domínio físico) acham-se os efeitos (campo de concentração) através das equações associadas a cada metodologia. Uma vez que o problema direto esteja estabelecido na descrição da dispersão de poluentes e sendo conhecidas as concentrações de contaminantes em sensores observacionais, podem-se descrever como incógnitas alguns parâmetros atmosféricos (parâmetros turbulentos ou não), ou mesmo as fontes poluidoras envolvidas no problema.

O modelo de dispersão estocástico Lagrangeano LAMBDA será utilizado para análise do ciclo bio-geoquímico do gás carbônico (CO_2) (também pode ser empregado para outros gases quimicamente inertes), que é tema de doutorado de um dos autores (F. P. Paes). O CO_2 é um dos principais componentes dos gases do efeito estufa. O aumento da concentração de gases do efeito estufa é o mecanismo para o “aquecimento global” (aumento da temperatura em todo o planeta). As emissões de gases poluentes como o CO_2 são provenientes da queima de combustíveis fósseis. O desmatamento é outro grande responsável pelo aumento das emissões, devido, principalmente, ao crescimento das áreas urbanas, as áreas agrícolas, juntamente com as queimadas. A destruição das florestas faz com que uma maior concentração de gás carbônico seja liberada e se acumule na atmosfera, bloqueando a saída do calor para o espaço e causando o chamado agravamento do efeito estufa.

2. Modelo Direto Lagrangiano

Na modelagem lagrangiana [Zannetti 1990], a abordagem estatística exige a necessidade de se determinar as Funções Densidade de Probabilidade (FDP) relativas às distribuições espaciais das parcelas de fluido que compõem o escoamento em um ambiente turbulento. Logo, a evolução espacial e temporal da concentração média de um dado contaminante em uma dada parcela de fluido é dada pela equação:

$$C(\vec{x}, t) = \iint_{-\infty}^t S(\vec{x}_0, t_0) P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) d\vec{x}_0 dt_0 \quad (1)$$

em que $C(\vec{x}, t)$ representa a concentração do contaminante na posição \vec{x} em dado momento t , $P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$ representa a FDP da parcela de fluido que está na posição \vec{x}_0 , no instante t_0 passa a ocupar a posição \vec{x} no tempo t , e $S(\vec{x}_0, t_0)$ representa a função que descreve a distribuição espacial e temporal da fonte em termos da massa do poluente, por unidade de volume, entre as posições \vec{x}_0 e \vec{x} nos instantes t_0 e t , respectivamente. O principal termo na Equação (1) é a FDP, representada por $P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$. Este parâmetro pode ser calculado através da determinação da trajetória de um conjunto de partículas

contidas no escoamento do fluido. Este conjunto de partículas deve ser suficientemente grande para garantir a determinação de uma trajetória relativamente precisa [Zannetti 1990].

2.1 Modelo Fonte-Receptor

Segundo Roberti (2005), o modelo fonte-receptor é uma alternativa de reduzir o custo computacional no cálculo da concentração, pois substitui a integração espacial e temporal de equações diferenciais, por um produto matriz-vetor.

Para N_f fontes que emitem um contaminante, que não sofre reações químicas no processo de transporte atmosférico, uma relação linear entre as N_f fontes e a concentração do contaminante medido em N_s sensores, pode ser escrita conforme a equação 2 [Roberti 2005a-b].

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} M_{ij} S_i \quad (2)$$

em que S_i ($\text{g m}^{-3} \text{s}^{-1}$) é a intensidade da i -ésima fonte, C_j é a concentração do j -ésimo sensor, M_{ij} é uma matriz de transição de estados conhecida como matriz fonte-receptor e seu cálculo é em função do modelo de dispersão atmosférico, que em nosso caso específico, é o modelo lagrangiano LAMBDA, pois é usado como modelo direto na estimação de fontes de poluição.

3 Modelo LAMBDA

O modelo LAMBDA (acrônimo para *LAgrangean Model for Buoyant Dispersion in Atmosphere*) foi empregado para estudar os processos de transporte e difusão de poluentes, em específico para um terreno plano [Ferrero et al. 1995; Ferrero and Anfossi 1998 a-b]. Este modelo foi desenvolvido e apresentado pelo grupo de física da atmosfera do *Istituto di Scienze dell'Atmosfera e del Clima* (ISAC) seção de Turim (Itália), órgão do *Consiglio Nazionale delle Ricerche* (CNR), liderado pelo Dr. Domenico Anfossi e é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para a velocidade aleatória, seguindo a derivação de Thomson em 1987 [Thomson 1987].

O modelo de integração regressivo [Seibert 2001] foi implementado durante a tese de Roberti (2005), com o intuito de torná-lo uma ferramenta apta ao estudo do modelo direto de maneira simples e ao mesmo tempo atender a várias características da realidade física que são necessárias para uma boa ferramenta científica.

O modelo de partículas LAMBDA simula aproximadamente 1000 partículas computacionais (fictícias) a cada passo de tempo, que emulam o comportamento de um contaminante no mundo real, com o objetivo de simular os movimentos atmosféricos como os sofridos por elementos de fluido ou contaminantes liberados na atmosfera. Em seguida, a concentração é calculada através do “tempo de residência” de cada partícula no volume do sensor. Este “tempo de residência” é calculado na prática contando-se o número de partículas presentes no subdomínio no intervalo [Roberti 2005].

3.1 Dispersão de Poluentes

A variação espacial é governada por duas áreas horizontais próximas e a variação temporal faz com que as fontes comportem-se como emissoras de um gás num intervalo de tempo e, posteriormente, como consumidoras. Um dos exemplos mais conhecidos

deste comportamento é o ciclo diurno do CO_2 , onde as plantas absorvem CO_2 durante o dia e, durante a noite, devido à respiração, são emissoras de CO_2 .

Roberti (2005) apresentou um cenário computacional, com altura da cobertura vegetal de 30 m de altura, sendo que cada uma tinha área horizontal de $500 \text{ m} \times 400 \text{ m}$, sobre um terreno plano. Os sensores foram dispostos em 3 linhas paralelas, a 40m de altura: 1° Linha: 800 m; 2° Linha: 1000 m; 3° Linha: 1200 m; e distantes entre si 50 m, na direção y, iniciando na posição 50 m até a posição 950 m. O centro horizontal de cada área de emissão é: A1: (300, 650); A2: (300, 250).

Neste trabalho, o cenário computacional sofreu alterações para aproximar as simulações dos padrões reais, como por exemplo uma região da floresta amazônica, ou seja, a área horizontal atual é de $600 \text{ km} \times 300 \text{ km}$, sobre um terreno plano. A Figura 1 mostra os sensores posicionados a 40 m de altura: 1ª linha: 210 km; 2ª linha: 270 km; 3ª linha: 330 km; e distantes entre si 30 km, na direção y, iniciando na posição 30 km até a posição 270 km. O centro horizontal de cada área de emissão em km é: A1: (90, 195); A2: (90, 45).

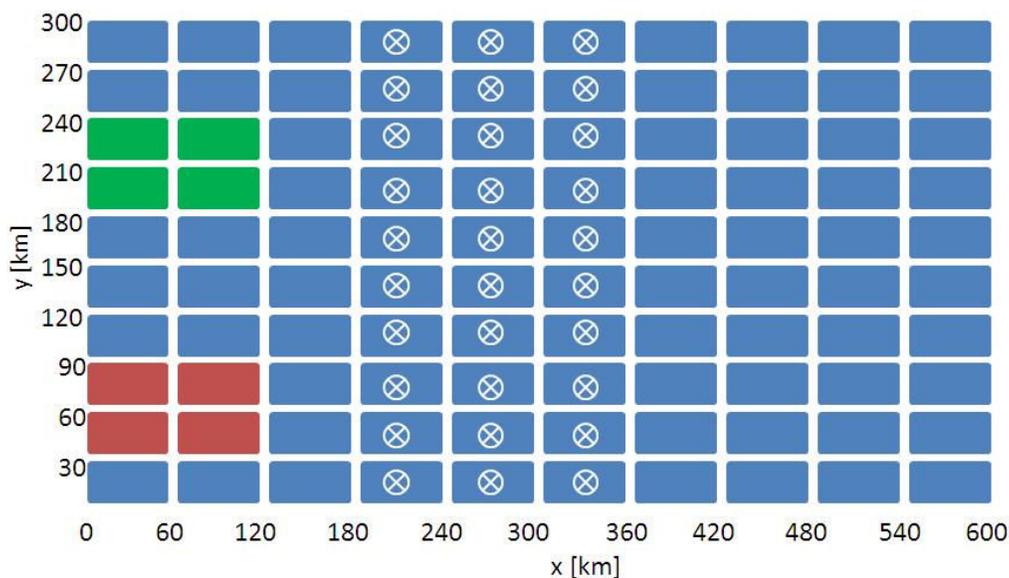


Figura 1. Projecção bidimensional do domínio físico; ⊗ representam a projecção horizontal dos sensores a 40 m de alturas.

O modelo LAMBDA foi adaptado para simular este cenário computacional e gerar os dados de concentração do gás nos sensores. Entre os dados meteorológicos utilizados neste experimento, destaca-se a direção do vento de $\theta=180^\circ$, que influencia diretamente nas concentrações obtidas nesta nova área, como serão mostrados nos resultados.

Alterações e modificações foram feitas no código LAMBDA (Figura 2) para simular a nova área de interesse e os resultados foram visualizados com o comportamento de 10 partículas com o tempo. As Figuras 3 e 4 representam os arquivos chamados: PARAMETER.DAT e METECO2.DAT, respectivamente, que são alterados conforme a configuração da nova área.

```

C-----
C          L A M B D A          *
C          -----          *
C  LAGRANGIAN MODEL FOR BUOYANT DISPERSION IN ATMOSPHERE *
C          *
C-----
C          *
C  VERSIONE CON UP-DOWN, T84, T87 (BG + GC)          *
C          *
C-----
C  AUTHORS : D. ANFOSSI          *
C          G. BRUSASCA          *
C          E. FERRERO          *
C          G. TINARELLI          *
C          S. ALESSANDRINI          *
C-----
C  -----
C  PROGRAM NAME
C  -----
          SUBROUTINE LAMBDA

```

(a)

```

C-----
C  INTERACTIVE OR BATCH INPUT CHOICE
C1111  FORMAT( ' 1 FOR INTERACTIVE INPUT '
C *    ' 2 FOR FILE INPUT PARAMETERS ', $)
C  READ(5,*,ERR=11111,END=11111) IRUN
          IRUN=2
          OPEN(UNIT=99,FILE='PARAMETER.DAT',STATUS='OLD')
          OPEN(UNIT=ILIS,FILE='INFOPA.DAT') !,STATUS='NEW')
          OPEN(UNIT=IERR,FILE='ERRORS.DAT') !,STATUS='NEW')
C-----
          WRITE(ILIS,*) '*****',
2          '*****'
          WRITE(ILIS,*)          ' L A M B D A '
          WRITE(ILIS,*) ' LAGRANGIAN MODEL FOR BUOYANT DISPERSION IN A',
2          ' ATMOSPHERE'
          WRITE(ILIS,*) ' LAST REV. : 31.01.1995 BY G.TINARELLI'
          WRITE(ILIS,*) '*****',
2          '*****'
C-----
C  IPTER : POINTER FOR LAST PARTICLE GENERATED

```

(b)

```

C-----
99  FORMAT( ' )
C   OPEN(UNIT=IEMISS,FILE='EMISS.DAT',STATUS='OLD')
C   OPEN(UNIT=IMETEO,FILE='METECO2.DAT',STATUS='OLD')
C-----
C
C
C   NCOMMS=15
C   DO 10002 II=1,NCOMMS
C     READ(IMETEO,33334)COMBID
C     READ(IEMISS,33334)COMBID
C 33334  FORMAT(A4)
C 10002  CONTINUE
C
C
C *****
C ***** STARTING TIME LOOP
C *****
C-----
C   LOOP FOR EACH TIME STEP GENERATING AND MOVING PARTICLES
C-----

```

(c)

Figura 2: Trechos do código LAMBDA.

```

-----
TYPE OF NUMERICAL SCHEME                               INDEX : ISCHEM
-----
GIVEN OPTIONS :
* 1* THOMSON84 SCHEME
* 2* DRIFDOD SCHEME = WILSON-UP AND DOWN
* 3* Igarbitter scheme
* 4* GEM-CHARLIER SCHEME 3
* 5* GEM-CHARLIER SCHEME 4
INPUT : SCHEM( )
4
CHOSEN OPTION : GEM-Charlier scheme 3
-----
DIMENSION OF COMPUTATIONAL DOMAIN
TYPE THREE REAL NUMBERS =>
INPUT : XMADOM (METRES) YMADOM (METRES) ZMADOM (METRES)
1500.000   1000.000   1120.000
-----
NUMBER OF TIME STEPS
TYPE AN INTEGER =>
INPUT : NTIMES ( --- )
1000
-----
DURATION OF A SINGLE TIME STEP
TYPE A REAL => < 600.
INPUT : DT ( SEC. )
1.000000
-----
INPUT : XMADOM (METRES) YMADOM (METRES) ZMADOM (METRES)
600000.000   300000.000   1120.000

INPUT : NTIMES ( --- )
10000

```

(a)

```

-----
START STEP AND SAVING FREQUENCY
TYPE TWO INTEGERS +0
-----
INPUT : NSAVIN ( --- ) NSAUVE ( --- )
      400      60
-----
INITIALISATION FROM RANDOM GENERATOR INDEX : IJSEED
-----
GIVEN OPTIONS :
* 1* SEED FIXED TO 1.0
* 2* SEED EXTERNALLY CHOSEN
* 3* SEED PSEUDORANDOM
INPUT IJSEED
      2
CHOSEN OPTION : SEED EXTERNALLY CHOSEN
-----
TYPE SEED VALUE
-----
INPUT : RSEED ( --- )
      231854.

```

(b)

Figura 3: Trechos do arquivo PARAMETER.DAT.

```

0
1
1120.000 0.010000 0.000
.415 0.000 0.000 0.600 0.400
400 2.0 10000.
-----
23 1800 DIR UX VY WZ TET UW
.00 8.710 .000 8.710 .000 .000 .000 0.000000
2.81 8.710 .000 8.710 .000 .000 284.000 0.000000
8.81 8.412 .000 8.412 .000 .000 284.000 0.000000
8.42 8.822 .000 8.822 .000 .000 284.000 0.000000
11.23 7.114 .000 7.114 .000 .000 284.000 0.000000
14.04 7.340 .000 7.340 .000 .000 284.000 0.000000
16.84 7.824 .000 7.824 .000 .000 284.000 0.000000
19.65 7.880 .000 7.880 .000 .000 284.000 0.000000
22.48 7.818 .000 7.818 .000 .000 284.000 0.000000
25.28 7.935 .000 7.935 .000 .000 284.000 0.000000
28.07 8.042 .000 8.042 .000 .000 284.000 0.000000
30.88 8.138 .000 8.138 .000 .000 284.000 0.000000
33.68 8.228 .000 8.228 .000 .000 284.000 0.000000
36.48 8.307 .000 8.307 .000 .000 284.000 0.000000
-----
C
1
1120.000 .010000 0.000
.415 0.000 0.000 0.600 0.400
400 2.0 10000.
-----
1 (numseq)
1120.000 (Zl) .010000 (Z0) 0.000
.415 (ustar) 0.000 0.000 0.600 0.400
400 (nível) 2.0 10000. (tdurm)

```

Figura 4: Trecho do arquivo METECO2.DAT.

4. Resultados

A Figura 5 apresenta a região de interesse antes das alterações feitas e nota-se que as partículas se propagam no menor domínio e saem em direção horizontal, já depois das modificações e adaptações do código LAMBDA e dos arquivos PARAMETER.DAT e METECO2.DAT, as trajetórias de apenas 10 partículas no domínio maior são simuladas para clara visualização (Figura 6) e encerram seus percursos devido o tempo estabelecido se encerrar.

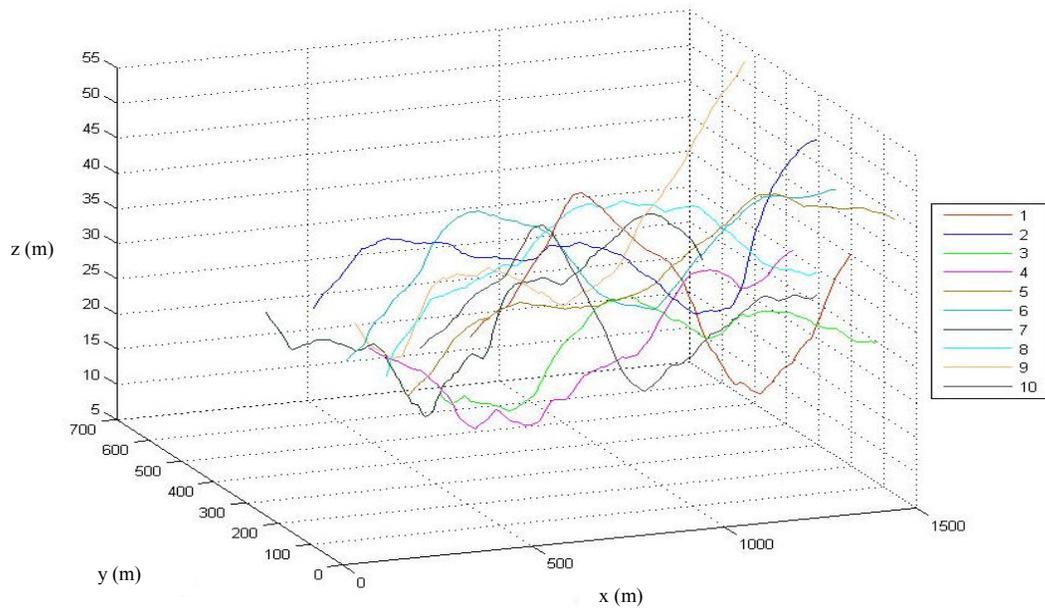
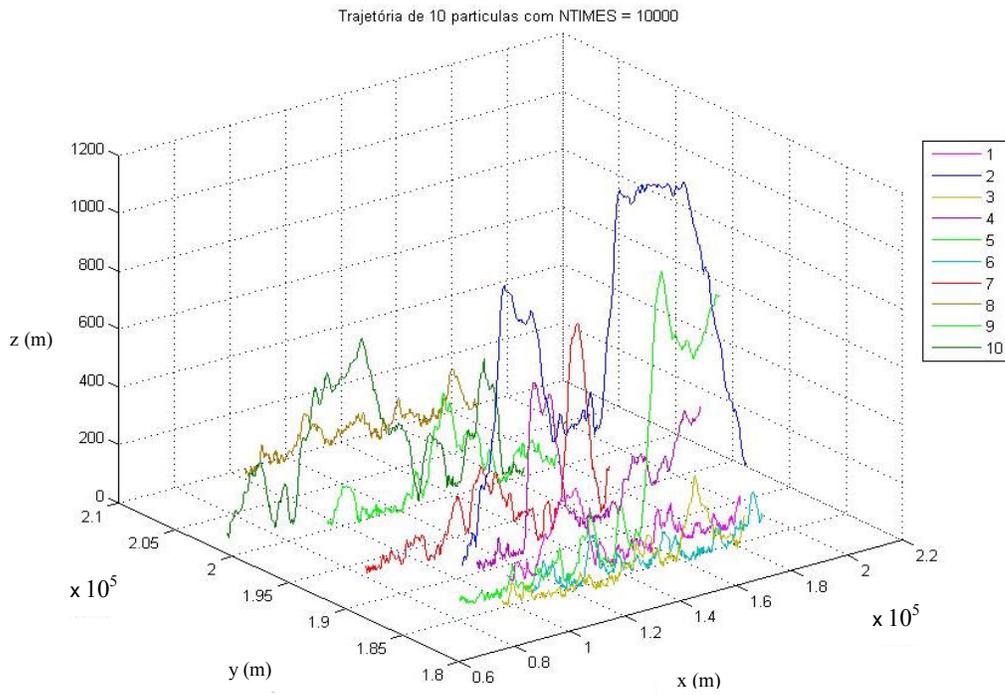


Figura 5: Trajeto de 10 partículas na área de 1500 m x 1000 m.



(a)

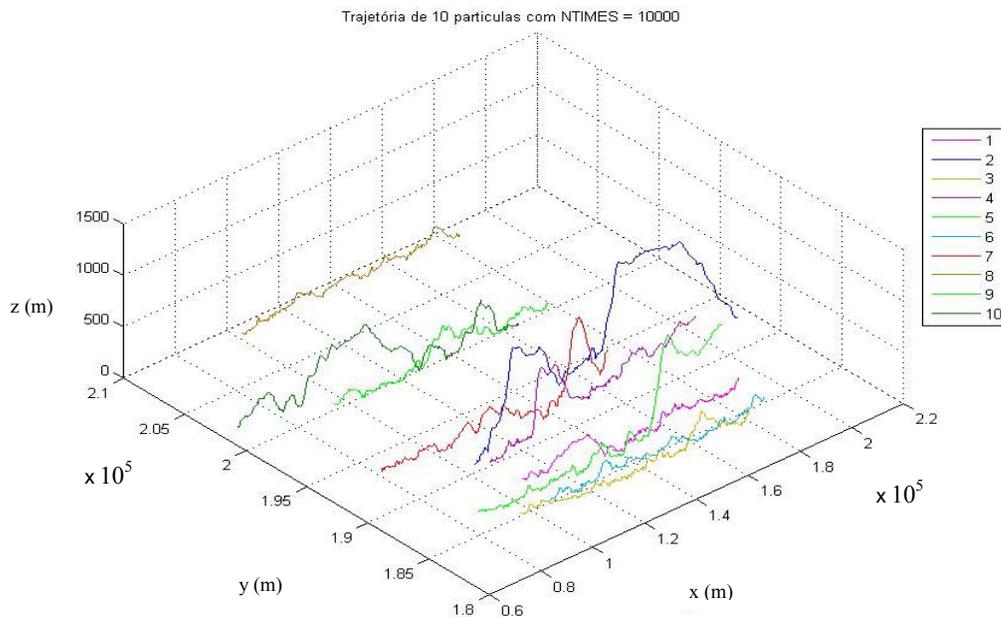


Figura 6: Trajeto de 10 partículas na área de 600 km x 300 km.

6. Considerações Finais

Este trabalho generaliza o modelo lagrangiano, representado pelo código LAMBDA, contribuindo para aplicação em qualquer domínio de grandes escalas. Os resultados obtidos com a simulação de 10 partículas computacionais por passo de tempo contribuiu para a validação do estudo e também mostrou que para aproximar-se de um cenário real, o tempo de emissão precisa ser maior em relação ao já utilizado (10000 passos de tempo), pois a trajetória de cada partícula não percorreu todo o domínio em análise. Sugerindo assim o aumento significativo do tempo de emissão e também o número de partículas emitidas para garantir a propagação delas em todo o domínio.

Referências

- Ferrero E.; Anfossi D. (1998a) Sensitivity analysis of Lagrangian Stochastic models for CBL with different PDF's and turbulence parameterizations". *Air Pollution Modelling and its Applications XII*, S.E. Gryning and N. Chaumerliac eds., Plenum Press, New York, p. 673-680.
- Ferrero, E.; Anfossi D. (1998b) Comparison of PDFs, closures schemes and turbulence parameterizations in lagrangian stochastic models. *International Journal of Environment and Pollution*, v. 9, p. 384-410.
- Roberti, D. R. (2005). Problemas inversos em física da atmosfera. Santa Maria: UFSM, 2005. 141 p. Tese (Doutorado em Física) – Centro de Ciências Naturais e Exatas, Universidade Federal de Santa Maria- RS.
- Roberti, D. R.; Anfossi, D.; Campos Velho, H. F.; Degrazia, G. (2005a) Estimation of Emission Rate of Pollutant Atmospheric Source. In: *5th International Conference on*

Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice, 2005, Cambridge. Proc of the 5th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice.

Roberti, D. R.; Anfossi, D; Campos Velho, H. F.; Degrazia, G. (2005b). Estimação da taxa de emissão e localização de fontes. *Ciência e Natura*, Santa Maria, v. Esp, p. 131-134.

Seibert, P. (2001) Inverse modelling with a Lagrangian particle dispersion model: application to point releases over limited time intervals, *Air Pollution Modeling and its Application XIV*, 381–389.

Thomson, D. J. (1987) Criteria for selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 180, p. 529-556.

Zannetti, P. (1990) *Air Pollution Modeling. Teories, Computational Methods and Available Software*. Nova York: Kluwer Academic Publisher. 444p.