Simulação de dispersão atmosférica com um modelo de diferenças finitas

27 de novembro de 2018

Considere o problema de dispersão atmosférica

$$U\frac{\partial C}{\partial x} = K\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \alpha^2\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial C(x,0)}{\partial z} = \frac{\partial C(x,h)}{\partial z} = 0, \tag{3}$$

$$C(0,z) = \frac{Q}{U}B(z), \tag{4}$$

onde $h = 1000\,\mathrm{m}$ representa a altura da camada-limite atmosférica; $Q = 1000\,\mathrm{\mu g\,s^{-1}}$ é a vazão mássica de poluente emitida pela chaminé, $U = 10\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ e $K = 10\,\mathrm{m^2\,s^{-1}}$ são duas constantes que representam, respectivamente, uma velocidade de advecção e um coeficiente de difusão turbulenta na vertical, e

$$\alpha^2 = \frac{K}{U}, \tag{5}$$

$$B(z) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma}, & |z - z_e| \le \sigma/2, \\ 0, & |z - z_e| > \sigma/2. \end{cases} \tag{6}$$

Em (6), a função $B(z)$ representa uma emissão localizada em uma região delgada, de espessura $\sigma = 10\,\mathrm{m}$, em torno da altura de emissão (a altura da chaminé) $z_e = 300\,\mathrm{m}$.

Postulamos que a solução analítica é

$$C(x,z) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \mathrm{e}^{-k_n^2\alpha^2 x}\cos(k_n z), \tag{7}$$

onde

$$k_n = \frac{\pi n}{h}. \tag{8}$$

É fácil verificar que a solução postulada atende à equação diferencial (2). Além disso, observe que (7) atende automaticamente às condições de contorno (3). Finalmente, a integral em z de (7) é constante:

$$\int_0^h C(x,z)\,dz = \frac{a_0 h}{2}. \tag{9}$$

Precisamos dos coeficientes de Fourier: em $x = 0$,

$$\frac{Q}{U}B(z) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(k_n z). \tag{10}$$

Para calcular a_0, simplesmente integre:

$$\frac{Q}{U}\int_0^h B(z)\,dz = h\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{\int_0^h a_n \cos(k_n z)\,dz}_{\equiv 0} \Rightarrow$$

$$a_0 = \frac{2Q}{hU}. \tag{11}$$

Para os demais coeficientes, $m > 0$,

$$\begin{aligned}
\frac{Q}{U}B(z)\cos(k_m z) &= \frac{a_0}{2}\cos(k_m z) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(k_n z)\cos(k_m z),\\
Q\int_0^h B(z)\frac{\cos(k_m z)}{U}\,dz &= \frac{a_0}{2}\int_0^h \cos(k_m z)\,dz + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_0^h \cos(k_n z)\cos(k_m z)\,dz,\\
\frac{Q}{U\sigma}\int_{z_e-\sigma/2}^{z_e+\sigma/2} \cos(k_m z)\,dz &= \frac{a_0}{2}\int_0^h \cos(k_m z)\,dz + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_0^h \cos(k_n z)\cos(k_m z)\,dz,\\
\frac{2Q}{U\sigma k_m}\,\mathrm{sen}\left(\frac{k_m\sigma}{2}\right)\cos(k_m z_e) &= \frac{a_0}{2}\int_0^h \cos(k_m z)\,dz + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_0^h \cos(k_n z)\cos(k_m z)\,dz. \qquad (12)
\end{aligned}$$

As funções no lado direito de (12) são ortogonais:

$$\int_0^h \cos(k_n z)\cos(k_m z)\,dz = \begin{cases} 0, & m \neq n,\\ h/2 & m = n \neq 0. \end{cases} \tag{13}$$

Segue-se que

$$a_m = \frac{4Q}{U\sigma\pi m}\,\mathrm{sen}\left(\frac{k_m\sigma}{2}\right)\cos(k_m z_e). \tag{14}$$

a) Programe a solução analítica truncando a série do 200º harmônico (**obrigatoriamente**):

$$\widehat{C}(x,z) \approx \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{N=200} a_n \mathrm{e}^{-k_n^2\alpha^2 x}\cos(k_n z). \tag{15}$$

Os resultados de (15) para os valores de x e z indicados acima devem ser impressos no arquivo `difatm-xxxx-ana.dat`. No seu relatório: discuta a convergência da série de Fourier para valores de N diferentes de 200. Plote alguns resultados.

c) Resolva (2) numericamente, utilizando o esquema

$$\begin{aligned}
\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta x} &= \frac{D}{U}\frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{\Delta z^2},\\
C_i^{n+1} - C_i^n &= \mathrm{Fo}(C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}),\\
-\mathrm{Fo}C_{i-1}^{n+1} + (1+2\mathrm{Fo})C_i^{n+1} - \mathrm{Fo}C_{i+1}^{n+1} &= C_i^n, \qquad (16)
\end{aligned}$$

onde

$$\mathrm{Fo} = \frac{D\Delta x}{U\Delta z^2}. \tag{17}$$

Cuidado! O tratamento das condições de contorno é por sua conta.

A condição inicial, dada por (4), apresenta um problema numérico potencialmente grande, e precisa ser discutida com mais detalhe. De fato, $B(z) \neq 0$ em uma região muito fina, de largura $\sigma = 10\,\mathrm{m}$, o que representa apenas 1% do domínio. Portanto, qualquer erro na sua representação repercutirá negativamente no esquema numérico. Para que a solução numérica seja acurada, portanto, os seguintes passos são essenciais:

1. Defina uma discretização vertical Δz bem menor do que σ.

2. Defina $B(z)$ por pontos com resolução Δz; seja $[i_a, i_b]$ o intervalo de índices para os quais $B(z_i) \neq 0$. Então, é fundamental que a integral *numérica* de $B(z)$ também seja unitária. Em outras palavras, **você deve se certificar de que**

$$\sum_{i \in [i_a, i_b]} B(z_i) \Delta z = 1.$$