

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL
CURSO DE MESTRADO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Dissertação de Mestrado

**PARAMETRIZAÇÃO DO FLUXO DE CONCENTRAÇÃO DE
CONTAMINANTES NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA: APLICAÇÃO
DE DERIVADAS FRACIONÁRIAS**

Claiton Müller

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal do Rio Grande, como requisito para obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart

Rio Grande, 2018

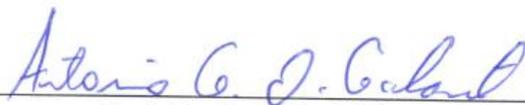
Claiton Müller

**“Parametrização do fluxo de concentração de contaminantes na camada limite planetária:
aplicação de derivadas fracionárias”**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal do Rio Grande, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre. Área de concentração: Modelagem Computacional.

Aprovada em

BANCA EXAMINADORA



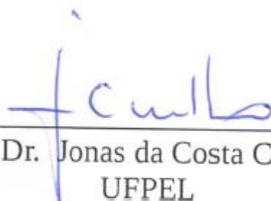
Prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart
Orientador – FURG



Prof.^a. Dr.^a. Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez
FURG



Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo
FURG



Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho
UFPEL

Rio Grande, 2018

Ficha catalográfica

M958p Müller, Claiton.
Parametrização do fluxo de concentração de contaminantes na camada limite planetária: aplicação de derivadas fracionárias / Claiton Müller. – 2018.
47 p.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Rio Grande/RS, 2018.

Orientador: Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart.

1. Equação da difusão 2. Derivadas fracionárias 3. Modelagem matemática 4. Concentração de contaminantes I. Goulart, Antonio Gledson de Oliveira II. Título.

CDU 004

*À minha família, em especial,
a meu vô Benô (in memoriam).*

AGRADECIMENTOS

Agradeço o prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart por me oportunizar a realização do curso de mestrado no PPGMC da FURG sob sua orientação, além do apoio, incentivo, dedicação e auxílios durante a realização desse trabalho.

Agradeço a minha família e amigos que mesmo distante sempre estiveram ao meu lado apoiando e incentivando as minhas decisões, em especial aos meus pais Aradi H. Müller e Fabiane da Costa.

Agradeço aos professores do programa pela colaboração em minha formação. Agradeço também aos professores e colegas do IFRS – Campus Bento Gonçalves, por participarem de forma ativa em minha formação e incentivar a realização de um curso de mestrado.

Agradeço aos colegas do PPGMC que tornaram esse período longe de casa mais prazeroso e por ajudarem nas necessidades encontradas nos estudos, em especial a colega e amiga Cristiana Pilatti pelo relevante auxílio na construção da rotina computacional.

Agradeço o PPGMC e a FURG pela oportunidade de realização do Curso.

Agradeço a Coordenadoria de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo auxílio financeiro para a realização da pesquisa.

Enfim, agradeço a todos que de alguma forma contribuíram direta ou indiretamente para a realização desse trabalho.

Daria tudo que sei, pela metade do que ignoro.

René Descartes

RESUMO

MÜLLER, Claiton. **Parametrização do Fluxo de Concentração de Contaminantes na Camada Limite Planetária: Aplicação de Derivadas Fracionárias**. 2018. 47 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós – Graduação em Modelagem Computacional. Universidade Federal de Rio Grande.

O presente trabalho apresenta uma proposta de parametrização do fluxo de concentração no termo difusivo da equação da difusão – advecção aplicada à modelagem da dispersão de contaminantes na Camada Limite Planetária. O grande diferencial dessa proposta está no emprego de um operador de ordem fracionária que substitui a derivada clássica de ordem inteira. Uma das principais vantagens do operador fracionário é ser um operador não-local. A propriedade de não-localidade considera que o próximo estado de um sistema não só depende de seu estado atual, mas também de todos os anteriores a partir do estado inicial. As equações clássicas geram uma distribuição Gaussiana para o movimento das partículas em um fluxo turbulento, enquanto que as equações com expoentes de ordem arbitrárias apresentam uma distribuição de Lévy. Os resultados obtidos no presente modelo foram comparados com os dados do experimento de Copenhague e validados a partir de um clássico conjunto de dados estatísticos obtidos na literatura. O modelo proposto obteve resultados satisfatórios em comparação com o modelo Gaussiano clássico.

Palavras – chave: Equação da Difusão; Derivadas Fracionárias; Modelagem Matemática; Concentração de Contaminantes.

ABSTRACT

MÜLLER, Claiton. **Parametrization of the Concentration Flow of Pollutants in the Planetary Boundary Layer: Application of Fractional Derivatives**. 2018. 47 f. Dissertation (Master degree) – Programa de Pós – Graduação em Modelagem Computacional. Universidade Federal de Rio Grande.

The present work presents a proposal of parameterization of the flow of concentration in the diffusive term of the diffusion – advection equation applied to the modeling of dispersion of contaminants in the Planetary Boundary Layer. The great differential of this proposal is the use of a fractional-order operator that replaces the classical whole-order derivative. One of the main advantages of the fractional operator is to be a nonlocal operator. The non-locality property considers that the next state of a system not only depends on its current state, but also on all previous ones from the initial state. The classical equations generate a Gaussian distribution for the motion of the particles in a turbulent flow, whereas the equations with arbitrary order exponents have a Lévy distribution. The results obtained in the present model were compared with the data from the Copenhagen experiment and validated from a classic set of statistical data obtained in the literature. The proposed model obtained satisfactory results in comparison to the classic Gaussian model.

Keywords: Diffusion – Advection Equation; Fractional Derivatives; Mathematical Modeling; Concentration of Contaminants.

LISTA DE FIGURAS

1.	FIGURA 1 – Ciclo diurno da Camada Limite Planetária	20
2.	FIGURA 2 – Valores de λ_n expressos pelo Mathematica.....	37
3.	FIGURA 3 – Valores de a_n expressos pelo Mathematica.....	37
4.	FIGURA 4 – Demonstrativo para o experimento de Copenhagen.....	39
5.	FIGURA 5 – Valores de concentração expressos pelo Mathematica para $\alpha = 0.73$	47

LISTA DE TABELAS

1. TABELA 1 – Condições meteorológicas durante o experimento de Copenhagen.....39
2. TABELA 2 – Concentrações estimadas e observadas de vento lateralmente integrado para o experimento de Copenhagen.....41
3. TABELA 3 – Comparação entre os índices estatísticos do modelo tradicional e fracionário.....42

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos

L	Comprimento de Monin – Obukhov;
u_*	Velocidade de atrito;
g	Aceleração da gravidade;
J	Operador de integração;
D	Operador de diferenciação;
$\overline{w\theta}$	Fluxo de calor sensível;
\bar{u}	Velocidade média do vento;
\bar{c}	Concentração média;
c', u'	Componentes turbulentas;
K_i	Coefficientes de difusão ($i = x, y$ ou z);
$\overline{u'c'}$	Fluxos turbulentos de contaminantes;
h	Altura da camada limite planetária;
H	Altura da fonte poluidora;
Q	Intensidade da fonte poluidora;
\bar{c}_y	Concentração média integrada latitudinalmente;
E	Função de Mittag – Leffler;
a_n	Constante gerada pela solução da EDO;
c_o	Concentração observada pelo experimento;
c_p	Concentração predita pelo modelo proposto.

Símbolos Romanos

k	Constante de Von Karman;
ϑ	Temperatura potencial média;
δ	Função Delta de Dirac;
Γ	Função Gamma de Euler;
α	Ordem da derivada;

$\gamma(x, u, t)$	Força de atrito exercida pelo fluido;
$\beta(x, u, t)$	Aceleração causada por perturbações no campo de pressão;
λ_n	Constante gerada pela solução da EDO.

Sobreescritos

'	Flutuações turbulentas;
—	Valores médios temporais.

LISTA DE ABREVIATURAS

CLP	Camada Limite Planetária;
CM	Camada de Mistura;
CR	Camada Residual;
CLE	Camada Limite Estável;
CS	Camada Superficial;
CLC	Camada Limite Convectiva;
EDP	Equação Diferencial Parcial;
EDO	Equação Diferencial Ordinária;
SF6	Hexafluoreto de Enxofre;
NMSE	Erro Quadrático Médio Normalizado;
COR	Coefficiente de Correlação;
FB	Fator de Inclinação;
FS	Desvio Padrão Fracionário;
FA2	Fator de Dois.

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	15
2.	OBJETIVOS	18
2.1	Objetivo Geral	18
2.2	Objetivos Específicos	18
3.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	19
3.1	Camada Limite Planetária	19
3.1.1	Camada Limite Convectiva	21
3.2	Cálculo Fracionário	22
3.2.1	Derivadas Fracionárias Segundo Riemann-Liouville	22
3.2.2	Derivadas Fracionárias Segundo Caputo	24
4.	MODELAGEM MATEMÁTICA	26
4.1	Modelo Matemático Fracionário	29
4.2	Modelo α – Gaussiano	31
5.	PERFORMANCE E VALIDAÇÃO DO MODELO	38
6.	CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS	43
	REFERÊNCIAS	44
	APÊNDICE	47

1. INTRODUÇÃO

A partir da revolução industrial, que iniciou na Europa entre os séculos XVIII e XIX, a sociedade passou por um intenso processo de industrialização. Com esse acelerado crescimento industrial e populacional, a emissão de gases poluentes na atmosfera atingiu níveis mais elevados e fez-se necessária a criação de leis que monitoram e regulamentam a qualidade do ar, visando contribuir para uma melhor qualidade de vida da população (COELHO, 2007). Mas para monitorar o nível de poluente no ar necessita-se compreender os fenômenos que estão por trás da dispersão desse contaminante e o comportamento da atmosfera em geral.

Na atmosfera terrestre existe uma série de variações ao longo de um ciclo diurno, como por exemplo, a variação de temperatura, velocidade do vento, incidência solar, umidade, dentre outras. Essas variações nos permitem particionar a atmosfera, de modo que as partes possam ser estudadas separadamente. A parte onde ocorre a dispersão dos poluentes é denominada Camada Limite Planetária (CLP), é a faixa mais baixa da atmosfera, variando sua espessura de 100 a 3000 metros de altura (STULL, 1988). Por sua proximidade com a superfície, essa camada é diretamente influenciada por forçantes relacionadas ao solo, como fluxos de calor, umidade, temperatura, atrito e vento médio.

Essas variáveis são indispensáveis para o estudo de fenômenos ocorrentes na CLP, tanto momentaneamente quanto para prever acontecimentos futuros. A previsão da distribuição de concentração para um determinado poluente lançado na atmosfera pode ser feita de duas formas: experimentalmente ou modelando o problema físico real por meio de equações matemáticas. Para a estimativa realizada com dados experimentalmente medidos, existe a vantagem de ser trabalhado com valores reais, porém encontram-se duas outras grandes desvantagens: o custo financeiro elevado e as dificuldades de medição. Nesse contexto é que a opção pela modelagem matemática ganha força, pois possui um baixo custo operacional e financeiro, além de possuir uma resposta rápida na geração de resultados, porém como desvantagem depara-se com o fato de trabalhar-se com aproximações físicas, feitas de acordo com o problema físico real (MALISKA, 2004).

A modelagem matemática do problema é amplamente utilizada no estudo de dispersão, pois permite realizar, com baixo custo econômico, simulações que estimam a concentração do contaminante, permitindo avaliar-se a qualidade do ar e seus impactos ambientais. Nessa área de simulações surge também a modelagem computacional como uma ferramenta facilitadora para

compilação de dados. Constantemente pesquisadores testam novos modelos matemáticos, buscando atingir resultados mais precisos e eficientes para dispersão de poluentes na atmosfera.

Dentre os trabalhos desenvolvidos na área, pode-se destacar: Degrazia (2000), apresentaram um modelo Euleriano semi-analítico, onde descreveram os coeficientes de difusão gerados por turbulência mecânica e térmica; Sastre (2005), utilizou-se de modelos Eulerianos e Gaussianos para simular a dispersão superficial de poluentes, liberados a partir de uma fonte contínua e pontual; Wortmann et al (2005), abordaram o problema de uma maneira diferenciada, utilizando-se das técnicas da Transformada de Laplace; Sharan e Modani (2006), no qual desenvolveu-se um modelo bidimensional para um poluente lançado a partir de uma fonte elevada e considerando o coeficiente de difusão como uma função da distância a favor do vento e a velocidade do vento como uma lei de potência em relação à altura; Moreira et al (2014), também utilizaram-se das técnicas da Transformada de Laplace, porém baseando-se nos modelos Fickiano e contra – gradiente; Carvalho et al (2016) também utilizam-se do modelo Gaussiano e de parametrizações alternativas para o coeficiente de difusividade, representando a mistura turbulenta nas camadas limites estável e residual, durante o processo de decaimento da turbulência dado pelo período do pôr-do-sol; Goulart et al (2017) utilizam, em uma primeira abordagem, o cálculo fracionário para modelar a dispersão de contaminantes na atmosfera usando derivada de ordem arbitrária no termo advectivo da equação de advecção – difusão e aplicam a teoria em um modelo de dispersão Euleriano;

O presente trabalho, no contexto acima exposto, propõe um estudo da dispersão de poluentes na atmosfera através da aplicação de uma tendência emergente no que se refere a matemática aplicada e modelagem matemática: a utilização do cálculo fracionário. Diferenciando-se dos demais, pela parametrização do fluxo turbulento de forma que a ordem do fluxo a ser parametrizado seja fracionária (arbitrária). O grande diferencial do uso de derivas de ordem fracionária deve-se ao fato de um operador de ordem fracionária ser um operador não-local, ou seja, a propriedade de não-localidade considera que o próximo estado de um sistema não só depende de seu estado atual, mas também de todos os estados anteriores a partir do estado inicial (DENG, 2007).

A performance do modelo proposto será avaliada confrontando-se os dados obtidos com o mesmo e dados experimentais obtidos por meio do experimento de Copenhagen (GRYNING, 1981; GRYNING E LYCK, 1984), e validada a partir de um conhecido grupo de índices estatísticos descritos por Hanna (1989).

Este trabalho está organizado em seis capítulos. O capítulo 2 descreve os objetivos geral e específicos da pesquisa. O capítulo 3 apresenta a fundamentação teórica, onde são abordados

conceitos fundamentais acerca da atmosfera e a tendência matemática emergente a ser utilizada no trabalho, o cálculo fracionário, bem como suas duas principais formulações. O capítulo 4 aborda a modelagem matemática do problema e suas equações governantes para o modelo Gaussiano trabalhado, além de apresentar a alteração do modelo clássico para o fracionário, baseando-se em uma parametrização alternativa para o fluxo turbulento. O capítulo 5 apresenta a performance e validação do modelo proposto, quando confrontados os dados preditos pelo mesmo com dados experimentais de um experimento realizado na Dinamarca e validade a partir de um renomado conjunto de dados estatísticos encontrados na literatura, além de abordar e discutir os resultados encontrados com a resolução e simulação do modelo. O capítulo 6 de considerações finais e trabalhos evidencia as vantagens na utilização das derivadas fracionárias na modelagem de dispersão de poluentes na atmosfera, além de apresentar perspectivas para continuação da pesquisa buscando-se resultados cada vez mais condizentes com a realidade.

Destaca-se que a relevância desse trabalho encontra-se na proposição de uma parametrização alternativa para o fluxo turbulento gerado pela existência de turbulência na atmosfera, resolvendo-se essa parametrização por meio uma ferramenta matemática emergente no campo de modelagem matemática e matemática aplicada.

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Este trabalho apresenta uma proposta alternativa de modelagem da dispersão de contaminantes na Camada Limite Planetária baseada no emprego de equações diferenciais de ordem fracionária que generalizam as equações clássicas de ordem inteira.

2.2 Objetivos Específicos

- Estudo de técnicas analíticas para a solução das equações diferenciais de ordem fracionária;
- Resolver as equações do modelo de dispersão Euleriano para estimar a concentração de contaminantes da atmosfera;
- Validar os resultados obtidos, comparando-os com dados experimentais;
- Comparar os resultados e a eficácia do modelo apresentado com outros modelos já existentes.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Essa seção está dividida em três partes sendo elas a definição e detalhamento do ambiente de estudo, uma introdução ao cálculo fracionário, ferramenta matemática fundamental deste trabalho e a apresentação dos modelos de dispersão com ênfase no modelo a ser utilizado, Euleriano.

3.1 Camada Limite Planetária

A camada limite planetária (CLP), segundo Stull (1988) é a região da atmosfera que sofre diretamente influência do solo terrestre e, conseqüentemente, responde a forçantes relacionadas ao mesmo. Ainda definindo CLP, Businger (1981) afirma que essa camada é caracterizada pela existência da turbulência, sendo a turbulência um dos principais fatores para a dispersão de um poluente no ar. Essa turbulência, ou de origem térmica (convecção do ar, que durante o dia é aquecido pelo contato com a superfície terrestre) ou de origem mecânica (ocasionada pelo atrito entre o ar e o solo), auxilia na classificação da CLP, como estável, neutra ou instável.

Durante o período diurno, os fluxos de origem térmica prevalecem sobre os de origem mecânica (deve-se ao fato da incidência solar sobre a superfície), o que gera uma melhor definição vertical da CLP, resultando em uma estrutura de subcamadas (STULL, 1988). Essas subcamadas são denominadas: Camada de Mistura (CM), Camada Residual (CR), Camada Limite Estável (CLE), Camada Superficial (CS), além de uma zona chamada na literatura de zona de entranhamento.

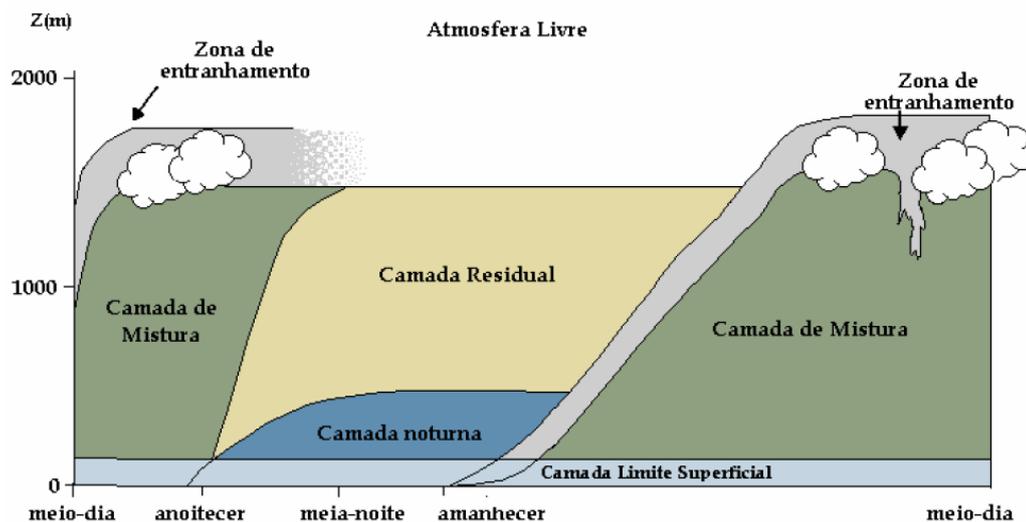


Figura 1: Ciclo diurno da CLP, adaptado de Stull 1988.

Ao amanhecer, inicia-se a formação da CM resultado do aquecimento da superfície pela radiação solar. Iniciando assim um fluxo positivo de calor tornando o ar mais quente, esse ar aquecido torna-se mais leve e menos denso que a parcela de ar logo acima e tende a subir, enquanto que o ar mais frio e mais denso desce, realizando rotineiramente o processo. Estes movimentos geram uma forte convecção que, segundo Kaimal (1976), originam grandes vórtices turbulentos proporcionando a mistura dos poluentes.

Com o anoitecer, a radiação solar incidente na superfície terrestre diminui, tornando-se insuficiente para manter o processo convectivo intenso, então a CM vai restringindo-se apenas a parte superior da CLP, formando uma outra camada, a Camada Residual. Esta camada não entra em contato com a superfície, e recebe essa nomenclatura pois a turbulência existente é apenas um pequeno resíduo daquela gerada ao longo do dia. Neste momento a atmosfera está mais quente que a superfície e é ela quem passa a ceder calor para o solo, quanto maior for o resfriamento da superfície, maior é a quantidade de calor que a atmosfera repassa ao solo, reduzindo a profundidade da Camada Residual (PAZ, 2004).

A CLE se mantém durante o período noturno, impedindo que a CR entre em contato com a superfície e ao amanhecer o ciclo novamente se inicia (STULL, 1988). A camada denominada de entranhamento é a camada onde ocorrem as trocas de calor e de quantidade de movimentos com a atmosfera livre.

Estudar todos os fenômenos ocorrentes na CLP tornaria o trabalho bastante complexo, partindo de que os mesmos não são invariantes no tempo e de que existem vários outros forçantes

aos quais estão sujeitos. Por isso, o presente trabalho tem como ambiente de estudo a Camada Limite Convectiva.

3.1.1 Camada Limite Convectiva

A Camada Limite Convectiva (CLC) é uma estrutura dependente de outras três camadas: Camada Superficial; Camada de Mistura; Zona de Entranhamento.

A primeira camada (CS) corresponde a cerca de 10% do total da CLP, é o local onde as forças inerciais predominam sobre as viscosas e também onde ocorre forte variação dos gradientes das variáveis atmosféricas médias como temperatura e momento. Para avaliar as inter-relações entre essas variáveis é utilizado a Teoria Universal de Similaridade de Monin-Obukhov desenvolvida em 1954 (MONIN; YAGLOM, 1971), e tem como parâmetro de avaliação do grau de estabilidade o comprimento de Monin-Obukhov (L):

$$L = - \frac{u_*^3}{\kappa \frac{g}{\vartheta} (\overline{w\theta})} \quad (1)$$

onde u_* é a velocidade de atrito; κ é a constante de Von Karman, comumente encontrada na literatura como 0,4 (YAMADA, 1979; BACHTIAR, DAVIES e DANSON, 2014; STULL, 1988); g é a aceleração da gravidade; ϑ é a temperatura potencial média; e $\overline{w\theta}$ é o fluxo de calor sensível. Esta medida indica a altura em que a intensidade da turbulência mecânica predomina em relação à de origem térmica.

Já a Camada de Mistura, região que corresponde a maior parte da CLC (compreendida entre o topo da CS e a zona de entranhamento) e que, como já mencionado, é onde ocorre grande mistura turbulenta ocasionada pela convecção térmica no período diurno. Nessa região os perfis verticais de temperatura e de velocidade podem ser considerados como sendo constantes.

A Zona de Entranhamento, localiza-se entre o topo da CM e a atmosfera livre. Nessa região o fluxo de calor é negativo e é onde o ar da atmosfera livre se entranha na camada de mistura.

3.2 Cálculo Fracionário

O cálculo fracionário tem sua origem em uma carta escrita por L'Hospital ao seu amigo Leibniz, onde questionava o significado de uma derivada de ordem meio ($1/2$). Porém, por ser um ramo da análise, durante muito tempo foi tratada como um campo matemático puramente teórico sem grandes aplicações em outras áreas (HILFER, 2000).

Entretanto nos últimos anos houve grande difusão de pesquisas nos mais diversos ramos da ciência, desde a física da difusão e fenômenos advectivos à controle de sistemas, finanças e economia (MACHADO, 2003). Esse avanço se deve principalmente pelo fato de derivadas e integrais de ordem não inteiras permitirem modelar diversos fenômenos naturais com aplicação nas mais variadas áreas, tais como: mecânica dos fluidos, fenômenos de transporte, redes elétricas, probabilidade e biomatemática.

O grande diferencial do uso de derivas fracionárias deve-se ao fato de um operador de ordem fracionária ser um operador não-local, ou seja, a propriedade de não-localidade considera que o próximo estado de um sistema não só depende de seu estado atual, mas também de todos os estados anteriores a partir do estado inicial (DENG, 2007). Decorrente disso, hoje em dia encontram-se na literatura vários pesquisadores que utilizam o cálculo fracionário em seus problemas, como por exemplo, no estudo de problemas difusivos (SCHNEIDER e WYSS, 1989), no estudo de cálculo variacional (AGRAWAL, 2006), na teoria cinética (ZASLAVSKY, 2002), entre outros.

Dentre as várias formas que podem ser definidas as integrais e derivadas fracionárias, destacam-se duas formulações mais utilizadas entre os matemáticos: a definição de Caputo de 1969 (formulação a ser utilizada no trabalho), e a de Riemann – Liouville, (PODLUBNY, 1999).

3.2.1 Derivada Fracionária Segundo Riemann – Liouville

As integrais de ordem fracionária são fundamentais para o estudo do cálculo fracionário de Riemann-Liouville, para esse estudo é importante definir os operadores pela esquerda e pela direita. Antes de começar as definições faz-se necessário definir os operadores que serão utilizados para denotar-se as operações de integração e diferenciação: J e D , respectivamente.

Define-se o operador J_a como uma função integrável num conjunto compacto em sua primitiva centrada em a . E para $n \in \mathbb{N}$, será usado D^n e J_a^n para denotar a n -ésima iterada de D e J_a .

Definição a. A função $\Gamma : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, conhecida como função Gamma de Euler, é definida por:

$$\Gamma(t) = \int_0^{\infty} s^{t-1} e^{-s} ds \quad (2)$$

Essa função torna-se bastante útil para generalizar a operação fatorial, o que é de fundamental importância no estudo de cálculo fracionário.

Definição b. Seja $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ contínua. A integral fracionária de Riemann-Liouville à esquerda (respectivamente à direita) de ordem $\alpha \in \mathbb{R}$ da função f no ponto x , é definida por:

$$J_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{f(u)}{(x-u)^{1-\alpha}} du \quad (\alpha \in \mathbb{R}_+; x > a) \quad (3)$$

e

$$J_b^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b \frac{f(u)}{(u-x)^{1-\alpha}} du \quad (\alpha \in \mathbb{R}_+; x < b) \quad (4)$$

Antes de definir as derivadas fracionárias de Riemann – Liouville, define-se que para inteiros positivos $n > m$, com $n, m \in \mathbb{N}$, vale a identidade:

$$D^m f(x) = D^n J_x^{n-m} f(x) \quad (5)$$

onde D^m é uma derivada usual de ordem inteira m .

Definição c. *Seja $f: [a,b] \rightarrow \mathbb{R}$ contínua. A derivada fracionária de Riemann-Liouville à esquerda (respectivamente à direita) de ordem $\alpha \in \mathbb{R}$ da função f no ponto x , é definida por:*

$$D_x^\alpha f(x) = D_x^n J_x^{n-\alpha} f(x) \quad \text{e} \quad D_b^\alpha f(x) = (-1)^n D_x^n J_b^{n-\alpha} f(x) \quad (6)$$

com $\alpha > 0, \alpha \in \mathbb{R}$ e $n = [\alpha] + 1$, ou seja:

$$D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_a^x \frac{f(u)}{(x-u)^{1+\alpha-n}} du, \quad x > a \quad (7)$$

e

$$D_b^\alpha f(x) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_x^b \frac{f(u)}{(u-x)^{1+\alpha-n}} du, \quad x < b \quad (8)$$

onde $D_x^n = \frac{d^n}{dx^n}$ é uma derivada usual de ordem inteira n .

3.2.2 Derivada Fracionária Segundo Caputo

Como visto nas equações (7) e (8) a derivada fracionária segundo Riemann – Liouville, é a derivada de ordem inteira de uma determinada integral fracionária. Já Caputo tem uma definição muito similar, porém invertendo a ordem de integração com a de derivação. A maior vantagem da definição de Caputo é que as condições iniciais para as equações diferenciais fracionárias são de ordem inteira, que possibilitam melhor interpretação física (PODLUBNY, 1999). Além disso, outra diferença entre as duas definições é que Caputo apresenta derivada de função constante igual à zero. Por causa dessa interpretação física da constante ser nula, encontram-se na literatura autores que afirmam que a derivada de Caputo é mais precisa que a de Riemann-Liouville (CAMARGO, 2009).

Definição d. A derivada fracionária de Caputo à esquerda (respectivamente à direita) de ordem $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$, é definida por:

$$\widehat{D}_x^\alpha f(x) = J_x^{n-\alpha} D_x^n f(x) \quad \text{e} \quad \widehat{D}_b^\alpha f(x) = (-1)^n J_b^{n-\alpha} D_x^n f(x) \quad (9)$$

com $n = [\alpha] + 1$, ou seja:

$$D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x \frac{f^{(n)}(u)}{(x-u)^{1+\alpha-n}} du \quad (x > a, a \in \mathbb{R}) \quad (10)$$

e

$$D_b^\alpha f(x) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \int_x^b \frac{f^{(n)}(u)}{(u-x)^{1+\alpha-n}} du \quad (b > x, b \in \mathbb{R}) \quad (11)$$

onde $f^{(n)}(u) = \frac{d^n f(u)}{du^n}$ são derivadas ordinárias de ordem inteira n .

No presente estudo será utilizado a formulação de Caputo. Devido ao fato da derivada de uma constante ser nula, o que possibilita melhor interpretação física do problema e gerar soluções regulares para o problema enquanto a formulação de Riemann – Liouville gera soluções singulares, pois não considera a variação de uma constante como zero.

4. MODELAGEM MATEMÁTICA

Para o estudo de fenômenos de transporte de contaminantes na atmosfera utilizam-se dois tipos principais de modelos: Lagrangeanos e Eulerianos.

Os modelos Lagrangeanos são ditos probabilísticos, ou seja, predizem a probabilidade de uma dada partícula ser encontrada em uma dada posição. Esse modelo representa a trajetória das partículas através de uma transformação estatística em um campo turbulento, onde as condições iniciais são fixas. O sistema de referência dos modelos Lagrangeanos segue o movimento atmosférico médio, baseado na equação de Langevin (VAN DOP, 1985):

$$du = \gamma(x, u, t)dt + \beta(x, u, t)dv \quad (12)$$

onde $\gamma(x, u, t)$ é um termo determinístico, que representa a força de atrito exercida pelo fluido sobre as partículas e $\beta(x, u, t)$ é um termo estocástico que representa as acelerações aleatórias causadas pela perturbação no campo de pressão.

Para obter-se a velocidade e a posição de cada partícula, em cada espaço de tempo, integram-se as seguintes equações:

$$\frac{du_i}{dt} = -\alpha u_i + \beta \quad \text{e} \quad \frac{dx_i}{dt} = U_i + u_i \quad (13)$$

onde i , segundo a notação de Einstein (STULL, 1988), pode assumir o valor de 1, 2 ou 3, x_i representa a posição das partículas, U_i é a velocidade média do vento, u_i é a velocidade turbulenta e α e β são os coeficientes de transporte de difusão.

Já os modelos Eulerianos (modelo a ser utilizado no presente trabalho) são ditos modelos determinísticos, ou seja, predizem a concentração de um contaminante por um determinado volume. Esse modelo baseia-se no estudo de um conjunto de equações de conservação de massa, onde a dispersão é estudada em termos de uma equação diferencial que é resolvida em um domínio fixo no espaço-tempo e descreve os valores instantâneos de propriedades que estão em processo de dispersão na atmosfera (NIEUWSTADT e VAN DOP, 1981).

Partindo da equação para conservação de uma quantidade escalar (STULL, 1988):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = \nu_c \frac{\partial^2 c}{\partial x_i^2} + S_c \quad (14)$$

onde c é a concentração do poluente, U a velocidade do vento, ν é a difusividade molecular e S é um termo de sumidouro ou fonte. Na equação (14) o terceiro termo (termo de difusão molecular), na atmosfera é de uma ordem de magnitude muito menor que os demais, por isso pode ser negligenciado. Expandindo-se os termos independentes (c e U) em componentes médias mais componentes turbulentas

$$c = \bar{c} + c' \quad U = \bar{u} + u' \quad (15)$$

Substituindo (15) na equação (14) e aplicando a média de Reynolds¹ tem-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = S_c + \frac{\partial (\overline{u'_i c'})}{\partial x_i} \quad (16)$$

onde \bar{c} é a concentração média do poluente, \bar{u} é a velocidade média do vento e $\overline{u'_j c'}$ representa os fluxos turbulentos de contaminantes nas direções longitudinal, latitudinal e vertical.

A equação (16) apresenta um problema de fechamento, onde encontra-se um número de incógnitas superior ao número de equações. Mas esse problema pode ser resolvido considerando uma parametrização para os fluxos turbulentos, assumindo por hipótese que os fluxos turbulentos sejam proporcionais ao gradiente da concentração média. Essa ferramenta utilizada para resolver o problema de fechamento é conhecida como Teoria-K e está relacionada com a estrutura física do fluxo turbulento (BATCHELOR, 1949). A constante de proporcionalidade, K , utilizada é denominada coeficiente de difusão e consiste em:

$$\overline{u'_i c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (17)$$

¹ Da média de Reynolds tem-se que a média de uma componente média é a própria componente média e que a média de uma componente turbulenta é zero (STULL, 1988).

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \quad (18)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (19)$$

Onde K_x, K_y, K_z são os coeficientes de difusão nas direções x, y e z , respectivamente.

Usando a notação de somatório de Einstein, substituindo as relações (17), (18) e (19) na equação (16), considerando estado estacionário e alinhando o sistema de coordenadas de forma que a direção x coincida com a direção do vento médio, tem-se:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (20)$$

Integrando-se a equação (20) em relação à y de $-\infty$ à $+\infty$, desprezando a difusão longitudinal, devido ao transporte de contaminantes através da advecção ser muito mais intenso do que o transporte por difusão, obtém-se:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial z} \right) \quad (21)$$

Onde \bar{c}_y representa a concentração média integrada latitudinalmente. A expressão (21) está sujeita às seguintes condições de contorno:

- Supõe-se que o solo é uma superfície perfeitamente refletora e, conseqüentemente, o fluxo na superfície desaparece e que o poluente não é capaz de penetrar através do topo da camada limite convectiva.

$$K_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial z} = 0 \quad z = 0; \quad z = z_i \quad (22)$$

- O poluente é libertado a partir de uma fonte elevada de resistência Q , localizada à $(0, H)$.

$$\bar{u}c_y(0, z) = Q\delta(z_0 - H) \quad 0 < H < h \quad (23)$$

Onde H é a altura da fonte e δ é a função delta de Dirac. O resultado encontrado para o modelo clássico gera uma distribuição Gaussiana para o movimento das partículas em um fluxo turbulento.

4.1 Modelo matemático fracionário

Para modelar o termo advectivo se considera que a dispersão de um escalar passivo (poluente não interativo) inserido em um escoamento turbulento na CLP ocorre de forma anômala, no sentido de que o deslocamento quadrático médio não é linear com o deslocamento da partícula, mas é uma potência fracionária deste ($\langle z^2 \rangle \propto x^\alpha$). Neste caso o termo advectivo da equação da difusão-advecção deve apresentar uma derivada de ordem não inteira (GOULART, et al, 2017). Enquanto para o termo difusivo considera-se uma nova parametrização do escoamento turbulento apresentado nas equações (17), (18) e (19), objetivando a substituição da distribuição Gaussiana pela distribuição de Lévy para o movimento de partículas em um escoamento turbulento (SORNETTE, 2006). A parametrização do fluxo de concentração na direção vertical tem a seguinte forma:

$$\overline{w'c_y'} = -K \frac{\partial^\alpha \overline{c_y}}{\partial z^\alpha} \quad (24)$$

onde $0 < \alpha \leq 1$.

Considerando a modelagem do termo advectivo proposta por Goulart et al (2017) e a equação (24) como parametrização para o fluxo de concentração obtém-se a seguinte equação da difusão-advecção fracionária para estimar a distribuição de concentração de poluentes emitidos por fontes pontuais contínuas na CLP:

$$\bar{u} \frac{\partial^\alpha \overline{c_y}}{\partial x^\alpha} = K \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^\alpha \overline{c_y}}{\partial z^\alpha} \right) \quad (25)$$

onde \bar{u} é a velocidade média do vento e K é o coeficiente de difusão.

Destaca-se que para esse modelo fracionário considera-se a velocidade média do vento e o coeficiente de difusão como constantes, afim de que, mesmo trabalhando com parametrizações rudimentares, obtém-se resultados satisfatórios com a utilização das derivadas fracionárias em comparação com o modelo tradicional. O valor para velocidade média do vento é obtido através dos dados do experimento utilizado para validação do modelo, enquanto o valor para o coeficiente de difusão é dado pela relação:

$$K = \frac{1}{x} \int \frac{\sigma_w^2}{\bar{u}} x dx \quad (26)$$

Onde \bar{u} é a velocidade média do vento e σ_w é o desvio padrão da componente vertical da velocidade do vento (ambos dados pelo experimento de Copenhagen). Com a alteração na ordem das derivadas, o presente modelo está sujeito as seguintes condições de contorno:

$$D_z^\alpha Z(z) = 0 \quad \text{em} \quad z = 0 \quad \text{e} \quad z = h \quad (27)$$

e

$$U\bar{c}_y(0, z) = Q \delta(z - H) \quad (28)$$

A equação diferencial parcial (25) pode ser resolvida analiticamente utilizando o método de separação de variáveis. Para isso assume-se que a equação (25) tem uma solução da seguinte forma:

$$\bar{c}_y(x, z) = X(x)Z(z) \quad (29)$$

Decorrente da aplicação do método de separação de variáveis (29) na equação (25), encontra-se duas equações diferenciais ordinárias nas variáveis x e z . Onde as equações a ser obtida para as variáveis x e z serão fracionárias, visto que $0 < \alpha \leq 1$.

$$D_x^\alpha X + \kappa\lambda^2 X = 0 \quad (30)$$

e

$$\frac{d}{dz} (D_z^\alpha Z(z)) + \lambda^2 Z(z) = 0 \quad (31)$$

Onde $\kappa = K/U$.

4.2 Modelo α - Gaussiano

A equação diferencial (30), decorrente da inclusão da ordem fracionaria no termo advectivo, possui solução conhecida (GOULART et al, 2017):

$$X(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n E_\alpha(-\lambda_n^2 \kappa x^\alpha) \quad (32)$$

onde E_α é uma função de Mittag – Leffler, dada pela relação:

$$E_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(\alpha n + 1)} \quad (33)$$

Para a resolução da EDO (31) inicia-se utilizando a definição de derivadas fracionárias:

$$D_z^\alpha (z^n) = \frac{\Gamma[n+1]}{\Gamma[n-\alpha+1]} z^{n-\alpha} \quad (34)$$

Supondo a solução da equação (31) sendo da forma de série de potências de Frobenius:

$$Z(z) = z^p \cdot \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^{\alpha n + n} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^{(\alpha+1)n+p} \quad (35)$$

como a_n é uma constante, por conveniência toma-se da forma $\frac{a_n}{\Gamma[(\alpha+1)n+\beta]}$, ou seja:

$$Z(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{\Gamma[(\alpha+1)n+\beta]} z^{(\alpha+1)n+p} \quad (36)$$

onde p e β são constantes. A convergência da série verifica-se pelo teste da razão e constata-se que a série possui um raio de convergência maior do que as distâncias utilizadas no experimento de validação do modelo, o que garante que a solução do modelo converge para a solução experimental.

Abrindo o primeiro termo do somatório e utilizando a definição de derivadas fracionárias (34) na equação (36), tem-se:

$$D_z^\alpha(z) = \frac{a_0}{\Gamma[\beta]} D_z^\alpha z^p + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n}{\Gamma[(\alpha+1)n+\beta]} \frac{\Gamma[(\alpha+1)n+p+1]}{\Gamma[(\alpha+1)n+p+1-\alpha]} z^{(\alpha+1)n+p-\alpha} \quad (37)$$

Tomando $\beta = p + 1$ e derivando a equação (37) em relação à z ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} (D_z^\alpha z) &= \frac{a_0}{\Gamma[p+1]} \frac{d}{dz} (D_z^\alpha z^p) + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} [(\alpha+1)n+p-\alpha] \frac{a_n}{\Gamma[(\alpha+1)n+p-\alpha+1]} z^{(\alpha+1)n+p-\alpha-1} \end{aligned} \quad (38)$$

Reescrevendo $\alpha n + n - \alpha - 1 = (\alpha + 1)(n - 1)$ e fazendo-se $n' = n - 1$, logo²:

$$\frac{d}{dz} (D_z^\alpha z) = \frac{a_0}{\Gamma[p+1]} \frac{d}{dz} (D_z^\alpha z^p) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{n+1} \Gamma[(\alpha+1)n+p+1]}{\Gamma[(\alpha+1)n+p+2]} z^{(\alpha+1)n+p} \quad (39)$$

Para solucionar-se a equação (39) recai-se em duas possibilidades a serem consideradas, que serão chamadas de *caso 1* e *caso 2*, que referem-se a $p \neq 0$ e $p = 0$ respectivamente.

$$D_z^\alpha z^p = \begin{cases} 0, & \text{se } p = 0 \\ \frac{\Gamma[p+1]}{\Gamma[p+1-\alpha]} z^{p-\alpha}, & \text{se } 0 < p \leq 1 \end{cases} \quad (40)$$

Caso 1 ($0 < p \leq 1$): Se p encontra-se entre 0 e 1, tem-se novamente duas possibilidades de solução: $p = \alpha$ e $p - \alpha + 1 = -m$, onde $m \in \mathbb{N}$.

² Para não necessitar escrever n' toda vez, toma-se apenas n .

- Para o caso $p = \alpha$ gera solução da forma:

$$Z(z) = z^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} a_n E_{\alpha+1, \alpha+1}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) \quad (41)$$

Como a solução suposta para o modelo deu-se por separação de variáveis, então basta-se juntar as soluções encontradas para ambas as EDO's fracionárias (32) e (41), logo:

$$\bar{c}_y(x, z) = b_n E_\alpha(-\lambda_n^2 \kappa x^\alpha) \cdot z^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} a_n E_{\alpha+1, \alpha+1}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) \quad (42)$$

A solução (42) deve convergir para a solução tradicional do problema quando $\alpha = 1$ (que é em função de cosseno), no entanto quando $\alpha = 1$ a função de Mittag – Leffler, $E_{2,2}$, fica em função de seno. Portanto a solução (42) não é solução para o problema e deve ser descartada.

- Para o caso $p - \alpha + 1 = -m$ gera solução da forma:

$$Z(z) = z^{\alpha-1} \sum_{n=0}^{\infty} a_n E_{\alpha+1, \alpha}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) \quad (43)$$

A solução (43) para z contradiz a definição da formulação de Caputo (HERRMANN, 2011), visto que não respeita as hipóteses da definição de Caputo (onde Z^k , $k > -1$) por isso também pode ser descartada. Como ambas as possibilidades desse caso foram descartadas, então o caso 1 pode ser descartado.

Caso 2 ($p = 0$): Para $p = 0$ tem-se o primeiro termo da equação (38) sendo nulo, devido ao fato que pela formulação de Caputo a derivada fracionária de uma constante é igual a zero. Ou seja,

$$\frac{d}{dz} (D_z^\alpha z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{n+1} [(\alpha+1)n+1]}{\Gamma[(\alpha+1)n+2]} z^{(\alpha+1)n} \quad (44)$$

Decorrente da propriedade da função Gamma de Euler, $\Gamma[z + 1] = z\Gamma[z]$, tem-se:

$$\Gamma[(\alpha + 1)n + 2] = [(\alpha + 1)n + 1] \Gamma[(\alpha + 1)n + 1] \quad (45)$$

Substituindo a relação (45) na equação (44), obtém-se:

$$\frac{d}{dz} (D_z^\alpha z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{n+1}}{\Gamma[(\alpha+1)n+1]} z^{(\alpha+1)n} \quad (46)$$

Substituindo as equações (36) e (46) na EDO inicial (31)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{n+1}}{\Gamma[(\alpha+1)n+1]} z^{(\alpha+1)n} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{\Gamma[(\alpha+1)n+1]} z^{(\alpha+1)n} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_{n+1} + \lambda^2 a_n)}{\Gamma[(\alpha+1)n+1]} z^{(\alpha+1)n} = 0 \quad (47)$$

Como $z \neq 0$, pois essa seria a solução trivial. Então tem-se a seguinte relação:

$$a_{n+1} + \lambda^2 a_n = 0 \quad \Rightarrow \quad a_{n+1} = -\lambda^2 a_n \quad (48)$$

Seja (48) uma relação em que os valores de a estão relacionados diretamente com os valores assumidos por n , então para

$$\begin{aligned} n = 0 & \rightarrow a_1 = -\lambda^2 a_0 \\ n = 1 & \rightarrow a_2 = -\lambda^2 a_1 = -\lambda^2(-\lambda^2 a_0) = \lambda^4 a_0 \\ n = 2 & \rightarrow a_3 = -\lambda^2 a_2 = -\lambda^2(\lambda^4 a_0) = -\lambda^6 a_0 \\ n = 3 & \rightarrow a_4 = -\lambda^2 a_3 = -\lambda^2(-\lambda^6 a_0) = \lambda^8 a_0 \end{aligned}$$

De modo geral os valores de a em função de n podem ser descritos por

$$a_n = (-\lambda^2)^n a_0 \quad (49)$$

Substituindo a relação (14) na solução suposta (36) tem-se

$$Z(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\lambda^2)^n a_n z^{(\alpha+1)n}}{\Gamma[(\alpha+1)n+1]} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n (-\lambda^2 z^{\alpha+1})^n}{\Gamma[(\alpha+1)n+1]} \quad (50)$$

Da definição de função de Mittag – Leffler:

$$E_{a,b}(Z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{Z^n}{\Gamma[an+b]} \quad (51)$$

Substituindo a definição (51) na equação (50) fica-se com a solução para Z da seguinte forma:

$$Z(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n E_{\alpha+1}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) \quad (52)$$

Portando a solução geral final do problema (suposta por separação de variáveis) dá-se pelo produto das equações (32) e (52), ou seja

$$\bar{c}_y(x, z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n E_{\alpha}(-\lambda_n^2 \kappa x^{\alpha}) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} a_n E_{\alpha+1}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) \quad (53)$$

Para encontrar a solução específica do problema faz-se necessário determinar as constantes, a_n e λ_n , isso acontece aplicando-se as condições de contorno (27) e (28) na solução (53). Da aplicação da condição (27) tem-se

$$D_z^{\alpha} Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n (-\lambda_n^2)^n}{\Gamma[(\alpha+1)n+1]} D_z^{\alpha} (z)^{(\alpha+1)n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n (-\lambda_n^2)^n}{\Gamma[(\alpha+1)n+1-\alpha]} z^{(\alpha+1)n-\alpha} \quad (54)$$

Considerando a primeira possibilidade da condição (27), $z = 0$, tem-se $Z(z) = 0$ o que gera a solução trivial do problema, o que não é de interesse. Já para segunda possibilidade, $z = h$, encontra-se a equação para os λ_n :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (\lambda_n)^{2n+1} h^{(\alpha+1)n+1}}{\Gamma[(\alpha+1)n+2]} = 0 \quad (55)$$

Considerando a condição de contorno (28), tem-se

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n E_{\alpha+1}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) = \frac{Q}{u} \delta(z - H) \quad (56)$$

Multiplicando-se a equação (56) em ambos os lados por $E_{\alpha+1}(-\lambda_l^2 z^{\alpha+1})$ e integrando-se em relação a z de 0 à h obtém-se a equação para os a_n :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_0^h E_{\alpha+1}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) E_{\alpha+1}(-\lambda_l^2 z^{\alpha+1}) dz = \\ \frac{Q}{u} \int_0^h \delta(z - H) E_{\alpha+1}(-\lambda_l^2 z^{\alpha+1}) dz \end{aligned}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_0^h E_{\alpha+1}(-\lambda_n^2 z^{\alpha+1}) E_{\alpha+1}(-\lambda_l^2 z^{\alpha+1}) dz = \frac{Q}{u} \quad (57)$$

Após determinar-se as equações para as constantes, fez-se necessário a utilização de ferramentas computacionais para obter valores para as mesmas, visto que pela interdependência delas não era viável resolver analiticamente. Nesse contexto optou-se pela utilização do software *Wolfram Mathematica*³, devido ao fato de já possuir em suas bibliotecas as funções de Mittag – Leffler pré – programadas. Com auxílio do programa criou-se rotinas computacionais para encontrar-se os valores das constantes e posteriormente substituir na equação final juntamente com os demais dados retirados do experimento, conforme mostram as figuras 2 e 3.

³ Wolfram Mathematica (conhecido como Mathematica) é um programa de computador, originalmente concebido por Stephen Wolfram, e continuamente desenvolvido pela empresa Wolfram Research, que implementa um sistema de álgebra computacional. Além de uma linguagem de programação, contém diversas bibliotecas de programação prontas a serem usadas para diversos fins em várias áreas das ciências exatas. O programa insere-se em diversas áreas da engenharia, biologia, química, processamento de imagens, finanças, estatística, matemática, além de outras, e também serve como um ambiente para desenvolvimento rápido de programas. O programa utilizado para a realização do trabalho fez-se em um computador próprio da Universidade Federal do Rio Grande – FURG, no qual possui licença para o software.

```

U = 2.1; h = 1980; Q = 90; σw = 0.83; H = 115;
Kzx = (σw / U)² U x; X = 3700;
Kz = 1 / X NIntegrate[Kzx, {x, 0.001, X}];
j = 0.01;
LL = Table[NSolve[Sum[(-1)ⁿ λ²ⁿ⁺¹ (h)^(α+1)ⁿ⁺¹ / Gamma[(α+1) n + 2] = 0, λ, Reals], {α, 0.71, 0.79, 0.01}];
For[m = 1, m ≤ 9, m++,
  LL[[m]] = Drop[LL[[m]], 1];
  b = Length[LL[[m]]];
  Do[LL[[m]][[a]] = λ / . LL[[m]][[a]], {a, b}];
MatrixForm[LL]

```

$$\begin{pmatrix} \{-0.00740986, -0.00476372, 0., 0., 0.00476372, 0.00740986, 0.0716414\} \\ \{-0.0113644, -0.00721613, -0.00456848, 0., 0., 0.00456848, 0.00721613, 0.0113644, 0.0124247\} \\ \{-0.0108675, -0.00702383, -0.00438351, 0., 0., 0.00438351, 0.00702383, 0.0108675, 0.012294\} \\ \{-0.010443, -0.00683358, -0.00420796, 0., 0., 0.00420796, 0.00683358, 0.010443, 0.0121038\} \\ \{-0.0100614, -0.0066459, -0.00404113, 0., 0., 0.00404113, 0.0066459, 0.0100614, 0.0118837\} \\ \{-0.00971034, -0.00646121, -0.00388238, 0., 0., 0.00388238, 0.00646121, 0.00971034, 0.0116463\} \\ \{-0.0150031, -0.0112084, -0.00738215, -0.00517091, 0.00277315, 0., 0., 0.00277315, 0.00517091, 0.00738215, 0.0112084, 0.0150031, 0.0157525\} \end{pmatrix}$$

Figura 2 – Valores de λ_n expressos pelo Mathematica com α variando entre 0.7 e 0.8.

```

If[α == 0.79,
  eqns =
  Table[
    Sum[c[n] NIntegrate[MittagLefflerE[α + 1, -(LL[[9]][[n]])² 2 zⁿ⁺¹] MittagLefflerE[α + 1, -(LL[[9]][[a]])² 2 zⁿ⁺¹],
      {z, j, h}] == 0 / U MittagLefflerE[α + 1, -(LL[[9]][[a]])² Hⁿ⁺¹], {a, 1, 6, 1}];
  yyy9 = Solve[{eqns[[1]], eqns[[2]], eqns[[3]], eqns[[4]], eqns[[5]], eqns[[6]]}, {c[1], c[2], c[3], c[4], c[5], c[6]}];

```

```

{{c[1] → 0.103006, c[2] → 0.0225142, c[3] → 0.0216458}
{{c[1] → 0.134804, c[2] → 0.0506947, c[3] → 0.0314218, c[4] → 0.0216462}
{{c[1] → 0.129958, c[2] → 0.0488191, c[3] → 0.0327943, c[4] → 0.0216462}
{{c[1] → 0.125414, c[2] → 0.0476203, c[3] → 0.0339299, c[4] → 0.0216462}
{{c[1] → 0.121042, c[2] → 0.046798, c[3] → 0.0349079, c[4] → 0.0216462}
{{c[1] → 0.11679, c[2] → 0.0462256, c[3] → 0.0357649, c[4] → 0.0216461}
{{c[1] → 0.113614, c[2] → 0.0601779, c[3] → 0.0383559, c[4] → 0.0532864, c[5] → 0.0336758, c[6] → 0.0216466}
{{c[1] → 0.111403, c[2] → 0.0551452, c[3] → 0.0409536, c[4] → 0.05222, c[5] → 0.0345223, c[6] → 0.0216466}

```

Figura 3 – Valores de a_n expressos pelo Mathematica com α variando entre 0.7 e 0.8.

5. PERFORMANCE E VALIDAÇÃO DO MODELO

A performance do modelo proposto deu-se confrontando os dados obtidos com o mesmo e dados experimentais obtidos por meio do experimento de Copenhagen (1978 e 1979). Esse experimento foi realizado sob condições de estabilidade entre moderada e forte. Inicialmente Gryning (1981) publicou um denso relatório evidenciando o embasamento científico do mesmo, as técnicas utilizadas e os dados obtidos. Para a realização do experimento, foi montado um sistema de emissão de hexafluoreto de enxofre (SF₆) numa torre de televisão, em Gladsaxe (cidade vizinha a Copenhagen). As taxas de emissão foram constantes ao longo da amostragem, mas variavam entre 1,9 e 4,7 g/s de acordo com o dia em que o experimento era realizado, já a altura de emissão foi de 115 m, tendo altura de rugosidade aerodinâmica média de 0,6 m.

Para determinar a concentração do traçador, as amostragens foram realizadas entre 2 e 3 m acima do nível do solo, em três arcos circulares distantes da torre de emissão cerca de 2, 4 e 6 km e a concentração média foi medida em intervalos de 20 minutos, totalizando uma hora de tempo de amostragem (GRYNING, 1981). A Figura 4 apresenta um demonstrativo do Experimento de Copenhagen em que o ponto central onde encontra-se a “TV-TOWER” corresponde ao ponto de emissão e os demais pontos dispostos em arcos representam os amostradores e sua distribuição geográfica. As medidas realizadas foram de: velocidade do vento a 10, 60, 120 e 200 m acima do nível do solo em intervalos de 10 minutos; direção do vento a 10, 120, 200 m acima do nível do solo, também em intervalos de 10 minutos; temperatura a 2, 40, 80, 120, 160, 200 m acima do nível do solo durante 10 segundos, a cada 10 minutos.

Na altura da fonte de lançamento (115 m) foram realizadas medições tridimensionais de flutuações turbulentas de velocidade do vento. A altura da camada limite foi determinada a partir de radiossondagens diárias que foram realizadas próximas ao local do experimento (GRYNING, 1981; GRYNING, LYCK; 1984).

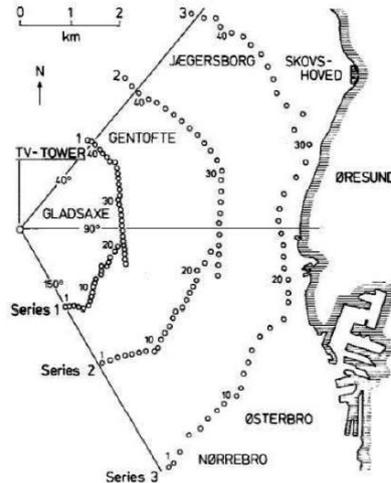


Figura 4 – Demonstrativo de Experimento de Copenhagen (GRYNING, 1981).

As condições meteorológicas durante o experimento também foram descritas por Gryning (1981) em seu relatório e podem ser observadas na Tabela 1, onde \bar{u}_{10} é a velocidade média do vento à altura de 10 m, u_* é a velocidade de fricção ou atrito e L é o comprimento de Monin – Obukhov (já definido pela equação 1).

TABELA 1 - Condições meteorológicas durante o experimento de Copenhagen

Exp.	$\bar{u}_{10}(ms^{-1})$	$u_*(ms^{-1})$	$L(m)$	$\sigma_w(ms^{-1})$	$h(m)$
1	2.1	0.37	-46	0.83	1980
2	4.9	0.74	-384	1.07	1920
3	2.4	0.39	-108	0.68	1120
4	2.5	0.39	-173	0.47	390
5	3.1	0.46	-577	0.71	820
6	7.2	1.07	-569	1.33	1300
7	4.1	0.65	-136	0.87	1850
8	4.2	0.70	-72	0.72	810
9	5.1	0.77	-382	0.98	2090

Para validar a performance dos modelos de dispersão, geralmente é encontrado na literatura, um conhecido conjunto de dados estatísticos descritos por Hanna (1989) que são definidos relacionando a concentração observada pelo experimento (c_o) e a quantidade predita pelo modelo proposto (c_p), as relações dão-se da seguinte forma:

$$\text{NMSE (erro quadrático médio normalizado)} = \frac{\overline{(c_o - c_p)^2}}{c_o c_p}$$

O NMSE é um valor adimensional que representa todos os desvios entre a quantidade observada no experimento e a prevista pelo modelo, seu valor ótimo é zero ou o mais próximo dele possível.

$$\text{COR (coeficiente de correlação)} = \frac{\overline{(c_o - \bar{c}_p)(c_p - \bar{c}_p)}}{\sigma_o \sigma_p}$$

O coeficiente de correlação descreve o grau de concordância entre as variáveis e o quando estas estão relacionadas entre si, o valor ótimo para esse índice é um ou o mais próximo possível disso. Juntamente com o fator de dois (FA2) o COR são os dois principais dados estatísticos analisados pelos pesquisadores para análise da validade de um modelo de dispersão.

$$\text{FB (fator de inclinação)} = \frac{\overline{c_o - \bar{c}_p}}{0.5 (\bar{c}_o + \bar{c}_p)}$$

Esse índice descreve o quanto o modelo tende a superestimar ou subestimar as concentrações observadas, dependendo de FB menor ou maior que zero, respectivamente. O valor ótimo para o fator de inclinação é zero ou o mais próximo possível.

$$\text{FS (desvio padrão fracionário)} = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0.5 (\sigma_o + \sigma_p)}$$

O FS representa exatamente a ideia de desvio padrão e o seu valor ótimo é zero ou o mais próximo possível.

$$\text{FA2 (fator de dois)} = 0.5 \leq \frac{c_p}{c_o} \leq 2$$

O FA2 descreve a possibilidade do valor predito pelo modelo estar entre a metade ou o dobro do valor observado pelo experimento. O valor ótimo para esse índice é um ou o mais próximo possível, porem quanto mais próximo dos valores ótimos estiverem os índices FA2 e COR maior será a confiabilidade do modelo.

Os valores das concentrações lateralmente integrada observada pelo experimento, estimada pelo modelo fracionário proposto (quando $\alpha = 0.73$) e estimada pelo modelo Gaussiano tradicional (expresso pela equação (21)) utilizados para validar o modelo podem ser observado na Tabela 2.

TABELA 2 – Concentrações observadas e estimadas, lateralmente integrada, $\frac{\bar{c}_y}{Q}$ ($10^{-4} sm^{-2}$) para o experimento de Copenhagen

Exp.	Distância (m)	Observado	Gaussiano	α – Gaussiano
1	1900	6.48	3.61	4.64
1	3700	2.31	2.72	3.74
2	2100	5.38	2.47	3.31
2	4200	2.95	1.76	2.54
3	1900	8.20	4.00	5.22
3	3700	6.22	3.73	4.58
3	5400	4.30	3.72	4.35
4	4000	11.7	10.25	10.64
5	2100	6.72	3.98	4.94
5	4200	5.84	3.93	4.49
5	6100	4.97	3.93	4.34
6	2000	3.96	1.72	2.31
6	4200	2.22	1.24	1.79
6	5900	1.83	1.12	1.62
7	2000	6.70	2.77	3.68
7	4100	3.25	1.95	2.81
7	5300	2.23	1.73	2.56
8	1900	4.16	3.51	4.74
8	3600	2.02	3.01	4.01
8	5300	1.52	2.95	3.71
9	2100	4.58	2.26	3.01
9	4200	3.11	1.61	2.31
9	6000	2.59	1.35	2.02

Enquanto a comparação da performance e confiabilidade entre os modelos tradicional e fracionário, baseados nos índices estatísticos de Hanna descritos anteriormente são apresentados na Tabela 3.

TABELA 3 – Comparação entre os índices estatísticos dos modelos tradicional e fracionário

Modelo	COR.	NMSE	FS	FB	FA2
Gaussiano	0.82	0.23	0.27	-0.39	0.73
α – Gaussiano	0.83	0.11	0.28	-0.16	0.95

Ao analisar a tabela 3 pode-se verificar que o Modelo α -Gaussiano tem um desempenho bastante satisfatório em relação ao Modelo Gaussiano tradicional para a dispersão de poluentes visto que os valores para o modelo proposto têm uma proximidade significativa aos valores ótimos propostos por Hanna (1989). Principalmente quando trata-se dos índices de correlação e fator de dois, índices estes que são os mais levados em consideração quando se deseja analisar a validade e garantir a confiabilidade do modelo.

A fim de estimar o melhor resultado para o modelo, inicialmente foram analisadas soluções para α indo de $\alpha = 0$ à $\alpha = 1$ em passos de 0.1. Percebeu-se que o intervalo com melhores resultados estavam entre $\alpha = 0.7$ e $\alpha = 0.8$, então refinou-se a busca nesse intervalo com passos de 0.01 e obteve-se $\alpha = 0.73$ como melhor α para o modelo, valor este que gerou os melhores índices estatísticos de Hanna.

É importante salientar que os modelos tradicionais ($\alpha = 1$) tem origem através da equação de difusão molecular baseada na Lei de Fick, que pressupõe uma distribuição de probabilidade Gaussiana, já o modelo fracionário assume a distribuição probabilística de Lévy, que descreve fisicamente o movimento de partículas em um fluxo turbulento de forma mais condizente com realidade atmosférica (METZLER, 2000).

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS

Nesse trabalho investigou-se o potencial do estudo e de aplicação das derivadas fracionárias para modelar a dispersão de poluentes na atmosfera. Nas últimas décadas o uso de operadores diferenciais fracionários emergiu significativamente em diversas áreas de aplicações da modelagem matemática, pois descreve de forma mais realística os fenômenos físicos encontrados na natureza. A utilização do cálculo fracionário no que diz respeito a modelagem atmosférica da difusão de poluentes é justificado pela presença de turbulência o que gera uma difusão anômala das partículas (METZLER e KLAFTER, 2000).

Entretanto, o uso de operadores fracionários na modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera ainda é um campo matemático pouco explorado. Nesse sentido, afim de explorar o potencial de aplicação de derivadas fracionárias como ferramenta para modelar a dispersão de poluentes, apresentou-se um modelo de equações diferenciais fracionárias (Modelo α – Gaussiano) para descrever a distribuição da concentração de um poluente não reativo na CLC, modelo esse baseado no modelo Gaussiano tradicional.

Os resultados desse modelo confrontou-se com o modelo de ordem inteira, afim de evidenciar resultados mais satisfatórios no modelo proposto. Com a resolução do modelo (25) observou-se que o Modelo α – Gaussiano tem uma performance mais satisfatória do que o Modelo Gaussiano de derivadas de ordem inteira no que refere-se a dispersão e concentração de contaminantes. Principalmente quando o α considerado é 0.73, valor esse no qual gerou-se os melhores resultados conformes critérios estabelecidos por Hanna (1989) e mais precisos se comparado ao modelo tradicional e confrontado aos resultados reais obtidos por meio de um experimento realizado em Copenhagen.

Estes resultados motivam cada vez mais investigações de aplicação das equações diferenciais fracionarias para modelar a equação de difusão de poluentes na CLC. Porém é importante observar que no presente trabalho escolheu-se substituir as derivadas de ordem inteira em ambos os termos da equação de difusão – adveccão, considerando principalmente uma parametrização fracionária para o fluxo de concentração baseado na Teoria – K.

Como alternativa para trabalhos futuros surge a possibilidade de explorar-se o coeficiente de difusão também relacionado com a ordem das derivadas dos termos difusivos e advectivo, utilizando-se dos pressupostos da teoria fractal.

REFERÊNCIAS

- AGRAWAL, O. P. **Fractional variational calculus and the transversality conditions**. J. Phys. A: Math, 2006.
- ARYA, S.P. **Modeling and parametrization of near-source diffusion in weak winds**. Journal of Applied Meteorology, 34, p. 1112-1122, 1995.
- BACHTIAR, V. S.; DAVIES, F.; DANSON, F. M. **A combined model for improving estimation of atmospheric boundary layer height**. Atmospheric Environment, 98, p. 461-473, 2014.
- BATCHELOR, G. K. **Small-scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid Part 1: General discussion and the case of small conductivity**. Journal Fluid Mech, 5, p. 113 – 133, 1959.
- BUSINGER, J. A. **Equations and Concepts**. In: __.F.T.M. NIEUWSTADT H. VON DOP (Ed.) Atmospheric turbulence and Air Pollution Modeling. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, p. 1 – 36. 1981.
- CAMARGO, R. F. **Cálculo Fracionário e Aplicações**. Tese de Doutorado, UNICAMP, 2009.
- CARVALHO, J. C.; REIS, J. K.; BUSKE, D.; QUADROS, R. S. **Pollutant Dispersion Simulation During Sunset Transition Time Using an Analytical Eulerian Model**. American Journal of Environmental Engineering, 6, p. 40-45, 2016.
- COELHO, S. Z. S. M. **Uma análise estatística com vistas a previsibilidade de internações por doenças respiratórias em função de condições meteorológicas na cidade de São Paulo**. Tese de Doutorado, USP, 2007.
- CSANADY, G. T. **Turbulent Diffusion in the Environment**. Dordrecht, Boston, 1973.
- DEGRAZIA, G. A.; ANFOSSI, D; CARVALHO, J. C; MANGIA, C; TIRABASSI, T. **Turbulence parameterization for pbl dispersion models in all stability conditions**. Atmospheric Environment, 34, p. 3575 – 3583, 2000.
- GOULART, A. G. O; LAZO, M. J; SUAREZ, J. M. S; MOREIRA, D. M. **Fractional derivative models for atmospheric dispersion os pollutants**. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 477, p. 9 – 19. 2017.
- GRYNING, S. E. **Elevated source SF6-tracer dispersion nexperiment sinthe Copenhagen area**. Riso National Laboratory, Roskilde, Relatório, 1981.
- GRYNING, S. E.; LYCK, E. **Atmospheric dispersion from elevated sources in a urban area: comparison between tracer experiments and model calculations**. Journal of Applied Meteorology 23, p. 651–660, 1984.

- HANNA, S. R. **Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods.** Atmospheric Environment, 23, p. 1385–1395, 1989.
- HERRMANN, R. **Fractional Calculus: An introduction for physicists.** World Scientific, 2011.
- HILFER, R. **Applications of Fractional Calculus in Physics.** 1ST Ed. World Scientific: Singapore, 2000.
- KAIMAL, J. C; WYNGAARD, J. C; HAUGEN, D. A; COTE, O. R; IZUMI, Y; CAUGUEY, S. J; READINGS, C. J. **Turbulence structure in the convective boundary layer.** Journal of the Atmospheric Sciences, 33, p. 2152 – 2169. 1976.
- MACHADO, J. A. T. **A probabilistic interpretation of the fractional-order differentiation.** Fractional Calculus & Applied Analysis, 6, p. 73-80. 2003.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** 2. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- METZLER, R; KLAFTER, J. **The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach.** Physics Reports, 339, p. 1 – 77. 2000.
- MONIN, A. S. and YAGLOM, A. M. **Statistical fluid mechanics.** Mit Press, Cambridge. 1971.
- MOREIRA, D. M; MORAES, A. C; GOULART, A. G; ALMEIADA, A; TOLEDO, T. **A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance.** Atmospheric Environment, v. 83, p. 254 – 259. 2014.
- NIEUWSTADT, F. T. M; VAN DOP, H. **Atmospheric Turbulence And Air Pollution Modelling.** Dordrecht: Academic Publishers, 1981.
- PAZ, S. R da. **Simulação numérica da atmosfera utilizando modelo digital de superfície para o estudo de dispersão de poluentes na região de Candiota.** Porto Alegre: PPGSR da UFRGS, 2004.
- PODLUBNY, I. **Fractional Differential Equations,** Mathematics in Science and Engineering, v. 198, Academic Press, San Diego, 1999.
- SASTRE, F. A. U; CAMPOS, C. R. J; DEGRAZIA, G. A; MOREIRA, D. M. **Simulação da dispersão de contaminantes em condições de forte convecção.** Revista Brasileira de Meteorologia, 20, p. 165 – 174. 2005.
- SCHNEIDER, W. R. and WYSS, W. **Fractional diffusion and wave equations.** J. Math. Phys. 30: p. 134–144. 1989.
- SHARAN, M; MODANI, M. **A two-dimensional analytical model for the dispersion of air-pollutants in the atmosphere with a capping inversion.** Atmospheric Environment, 40, p. 3479-3489. 2006.

SORNETTE, D. **Critical Phenomena in Natural Sciences**, Springer, 2nd Edition, 2006.

STULL, R. B. **An introduction to boundary layer meteorology**/Roland B. Stull. 1988.

VAN DOP, H; NIEUWSTADT, F.T.M; HUNT, J.C.R. **Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flow**. Phys. Fluids, 28, p.1639-1653, 1985.

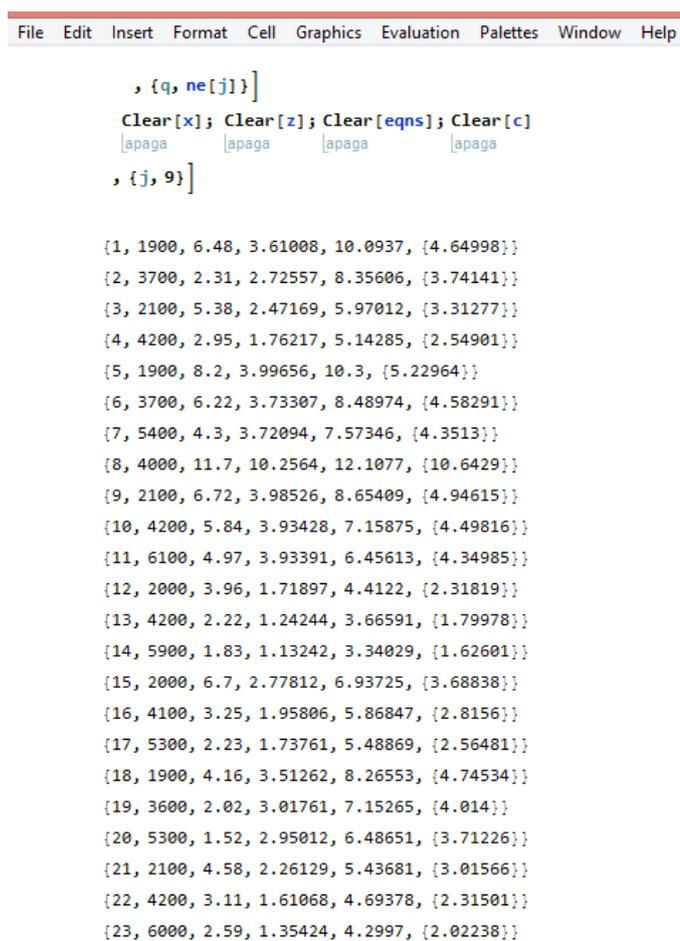
YAMADA, T. **PBL Similarity Profiles Determined from a Level-2 Turbulence-Closure Model**. Boundary Layer Meteorology. Dordrecht and Boston, v. 17, p. 333-351, 1979.

WORTMANN, S; VILHENA, M. T; MOREIRA, D. M; BUSKE, D. **A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL**. Atmospheric Environment, 39, p. 2171 – 2178. 2005.

ZASLAVSKY, G. **Chaos, Fractional kinetics and anomalous transport**. Physics Reports, 371, p. 461–580. 2002.

APÊNDICE

Apêndice A – Valores de concentração gerados pela rotina computacional criada



```

, {q, ne[j]}]
Clear[x]; Clear[z]; Clear[eqns]; Clear[c]
, {j, 9}]

{1, 1900, 6.48, 3.61008, 10.0937, {4.64998}}
{2, 3700, 2.31, 2.72557, 8.35606, {3.74141}}
{3, 2100, 5.38, 2.47169, 5.97012, {3.31277}}
{4, 4200, 2.95, 1.76217, 5.14285, {2.54901}}
{5, 1900, 8.2, 3.99656, 10.3, {5.22964}}
{6, 3700, 6.22, 3.73307, 8.48974, {4.58291}}
{7, 5400, 4.3, 3.72094, 7.57346, {4.3513}}
{8, 4000, 11.7, 10.2564, 12.1077, {10.6429}}
{9, 2100, 6.72, 3.98526, 8.65409, {4.94615}}
{10, 4200, 5.84, 3.93428, 7.15875, {4.49816}}
{11, 6100, 4.97, 3.93391, 6.45613, {4.34985}}
{12, 2000, 3.96, 1.71897, 4.4122, {2.31819}}
{13, 4200, 2.22, 1.24244, 3.66591, {1.79978}}
{14, 5900, 1.83, 1.13242, 3.34029, {1.62601}}
{15, 2000, 6.7, 2.77812, 6.93725, {3.68838}}
{16, 4100, 3.25, 1.95806, 5.86847, {2.8156}}
{17, 5300, 2.23, 1.73761, 5.48869, {2.56481}}
{18, 1900, 4.16, 3.51262, 8.26553, {4.74534}}
{19, 3600, 2.02, 3.01761, 7.15265, {4.014}}
{20, 5300, 1.52, 2.95012, 6.48651, {3.71226}}
{21, 2100, 4.58, 2.26129, 5.43681, {3.01566}}
{22, 4200, 3.11, 1.61068, 4.69378, {2.31501}}
{23, 6000, 2.59, 1.35424, 4.2997, {2.02238}}

```

Figura 5 – Valores de concentração expressos pelo Mathematica com $\alpha = 0.73$.