

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

**Modelo de Dispersão de Contaminantes na Camada Limite
Planetária Empregando o Cálculo Fracionário**

Andréia Zanchetti

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

Orientador: Prof. Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart

Rio Grande, 2017

Banca examinadora:

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho - UFPEL

Prof. Dr. Adriano de Cezaro - FURG

Prof. Dr. Antônio Gledson Oliveira Goulart - FURG

Ficha catalográfica

Z27m Zanchetti, Andréia.

Modelo de dispersão de contaminantes na camada limite planetária empregando o cálculo fracionário / Andréia Zanchetti. – 2017.
51 p.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, Rio Grande/RS, 2017.

Orientador: Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart.

1. Cálculo Fracionário 2. Equação de Difusão-Advecção
3. Concentração de Contaminante 4. Solução Analítica I. Goulart.
Antônio Gledson de Oliveira II. Título.

CDU 51:004

À minha mãe, Ieda.

AGRADECIMENTOS

À minha família, principalmente minha mãe Ieda M. S. Zanchetti, minha irmã Aline Zanchetti e minha madrinha Natalina J. C. Zaffari, pelo apoio, amor, paciência e suporte.

Ao Prof. Dr. Antônio Gledson Oliveira Goulart, pela orientação, disponibilidade e incentivo durante a realização deste trabalho.

Aos professores do Curso de Licenciatura em Matemática do IFRS Câmpus Bento Gonçalves, por incentivarem e acreditarem no meu potencial.

Aos professores do Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional da FURG, em especial aos coordenadores Prof. Dr. Jeferson Avila Souza e Prof.^a Dra. Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez, por oportunizarem o acesso e permanência no PPGMC.

Aos colegas do PPGMC, que estiveram sempre dispostos a criar grupos de estudos durante as disciplinas e a sanar dúvidas quando estas vinham a ocorrer.

Às amigas e amigos de longa data, os quais nunca trataram minha ausência e distância como um problema, em especial à Anelise, Francine, Suzane e Andressa.

Às conexões que aconteceram com diversas pessoas na cidade de Rio Grande e arredores, os quais me proporcionaram carinho, troca de experiências e me fizeram sentir em casa.

À FURG e ao PPGMC pela oportunidade e viabilização de recursos necessários para o seguimento deste trabalho.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro.

*Eu não tenho nenhum talento especial.
Sou apenas apaixonadamente curioso.*

— ALBERT EINSTEIN

RESUMO

ZANCHETTI, Andréia. **Modelo de Dispersão de Contaminantes na Camada Limite Planetária Empregando o Cálculo Fracionário**. 2017. 52 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional. Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande.

Neste trabalho foi investigado o potencial do cálculo fracionário para modelar a dispersão de contaminantes na Camada Limite Planetária Convectiva. Foi proposto um modelo que considera uma equação diferencial fracionária para a distribuição espacial da concentração de contaminantes não reativos na Camada Limite Planetária Convectiva. Os resultados obtidos foram comparados com os dados do experimento de Copenhague e com um modelo obtido na literatura. O modelo proposto neste trabalho apresentou um desempenho muito melhor do que o modelo gaussiano tradicional e ainda melhor do que o modelo encontrado na literatura que considerou o coeficiente de difusão como uma função da posição.

Palavras-chave: Cálculo Fracionário, Equação de Difusão-Advecção, Concentração de Contaminante, Solução Analítica.

ABSTRACT

ZANCHETTI, Andréia. **Dispersion of a Pollutant in the Planetary Boundary Layer Model using the Fractional Calculus**. 2017. 52 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional. Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande.

In the present work we investigate the potential of fractional derivatives to model atmospheric dispersion of pollutants. We propose a simple fractional differential equation model for the steady state spatial distribution of concentration of a non-reactive pollutant in Planetary Boundary Layer. We solve this model and we compare the solutions with a real experiment. We found that the fractional derivative model performs far better than the traditional Gaussian model and even better than models found in the literature where it was considered that the diffusion coefficient is a function in order to deal with the anomalous diffusion.

Keywords: Fractional Calculus, Diffusion-Advection Equation, Concentration of Pollutant, Analytical Solution.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Camada Limite Planetária. Adaptado de Stull (1988)	22
Figura 2	Esquema demonstrativo do Experimento de Copenhagen. Gryring (1981)	42

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Condições metereológicas durante o experimento de Copenhagen, 1978.	42
Tabela 2	Concentrações observadas e estimadas de vento lateralmente integrado $\frac{c^y}{Q}(10^{-4} sm^{-2})$ para o experimento de Copenhagen.	44
Tabela 3	Índices estatísticos utilizados para a validação dos modelos propostos (Eq. 71)	44

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADMM	Analytical Dispersion Multilayer Model
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CR	Camada Residual
Cor	Coefficiente de Correlação
EKF	Extended Kalman Filter
EPRI	Instituto de Pesquisa de Energia Elétrica
FA2	Fator de dois
FB	Fator de Inclinação
FS	Desvio Padrão Fracionário
GILTT	Técnica de Transformação Integrada de Laplace Integral
NMSE	Erro Quadrático Médio Normalizado
SF6	Hexafluoreto de Enxofre

LISTA DE SÍMBOLOS

\bar{c}	Concentração média do contaminante
c_o	Concentração observada do contaminante
c_p	Concentração predita pelo modelo
$\overline{c^y}$	Concentração média integrada lateralmente
δ	Função delta de Dirac
g	Aceleração da gravidade
Γ	Função gamma de Euler
H_s	Altura da fonte de emissão
${}_a J_x^\alpha$	Operador pela esquerda de Riemann-Liouville
${}_x J_b^\alpha$	Operador pela direita de Riemann-Liouville
K_x	Coefficiente de difusão na direção x
K_y	Coefficiente de difusão na direção y
K_z	Coefficiente de difusão na direção z
k	Expoente dependente da intensidade da turbulência
κ	Constante de Von-Kármán ($\kappa = 0.4$)
L	Comprimento de Monin-Obukhov
Q	Taxa de emissão do poluente
U	Componente do vento médio na direção x
u_*	Velocidade de atrito
u'	Velocidade da turbulência
$u(z)$	Velocidade do vento na direção longitudinal
$u(z_1)$	Velocidade do vento na altura z_1
ϑ	Temperatura potencial média
$\overline{u'c'}$	Fluxo turbulento do contaminante na direção longitudinal

$\overline{v'c'}$	Fluxo turbulento do contaminante na direção lateral
$\overline{w'c'}$	Fluxo turbulento do contaminante na direção vertical
$\overline{w\theta}$	Fluxo do calor sensível
σ_o	Desvio padrão observado
σ_p	Desvio padrão predito pelo modelo
σ_w	Desvio padrão da componente vertical
z	Altura da CLC
z_0	Comprimento de rugosidade

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	OBJETIVOS	21
2.1	Objetivo Geral	21
2.2	Objetivos Específicos	21
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	22
3.1	Camada Limite Planetária	22
3.1.1	Camada Limite Convectiva	23
3.2	Cálculo Fracionário	24
3.2.1	Derivada de Riemann-Liouville	26
3.2.2	Derivada de Caputo	27
4	MODELAGEM MATEMÁTICA	29
4.1	Modelo de Dispersão Euleriano Clássico	29
4.2	Modelo de Dispersão Euleriano Fracionário	30
4.3	Modelo α -Gaussiano	34
4.4	Modelo α -SM	36
5	PERFORMANCE DOS MODELOS	41
6	CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	46
	REFERÊNCIAS	48

1 INTRODUÇÃO

Com o crescimento populacional e industrial, a emissão de gases poluentes na atmosfera ganhou maiores proporções e, com isso, fez-se necessária a criação de leis que regulamentam a qualidade do ar. O intuito é contribuir na melhoria da qualidade de vida da população em geral através do estudo e compreensão dos fenômenos físicos, químicos e o comportamento da atmosfera em geral. Constantemente pesquisadores testam novos modelos matemáticos que produzam resultados precisos e de modo eficiente a fim de estimar com maior precisão os procedimentos adequados para tentar manter a qualidade do ar dentro dos padrões aceitáveis.

O transporte de partículas poluentes ocorre na parcela da atmosfera mais próxima da superfície da terra, denominada como Camada Limite Planetária (CLP) a qual responde a forçantes mecânicos como o cisalhamento do vento e a efeitos térmicos causados pelo aquecimento da superfície terrestre, ou seja, a CLP não é aquecida diretamente pelos raios solares, mas sim pelo fluxo de calor emitido pelo solo devido a incidência de radiação do sol. Outros elementos influenciam continuamente a CLP, tais como a umidade, as forças de atrito, a evaporação, emissão de poluentes e modificação de fluxo induzida pelo terreno, isto é, ocorrem variações de fluxo de calor e vento médio principalmente, se compararmos a superfície terrestre tomada de vegetação com a superfície marítima.

Um dos principais mecanismos de dispersão e transporte nessa atmosfera é a turbulência, caracterizada por movimentos de turbilhões de todas as escalas. Os movimentos turbulentos de pequena escala são responsáveis pela dissipação viscosa, já os movimentos turbulentos de grande escala contêm a energia cinética turbulenta e são os principais responsáveis pela dispersão. A natureza aparentemente aleatória dos movimentos turbulentos sugere um tratamento estatístico [1]. O conhecimento detalhado dos eventos que ocorrem na CLP, sejam eles, temperatura, vento médio, dispersão, advecção e transportes turbulentos, pode ser obtido através de modelos matemáticos específicos. A modelagem matemática é imprescindível no estudo desse ambiente, pois permite realizar simulações que estimam o campo de concentração dos poluentes, tornando possível também avaliar o impacto ambiental. As

técnicas clássicas encontradas na literatura para a otimização de modelos matemáticos podem ser divididas em duas classes básicas. A primeira é a obtenção de modelos fundamentais, a partir de balanços de massa, energia e quantidade de movimento e a segunda é a obtenção de modelos empíricos que é basicamente um ajuste matemático a partir de dados experimentais. Neste trabalho, porém damos ênfase ao surgimento de uma nova tendência, envolvendo a aplicação de uma ferramenta matemática baseada no uso de equações diferenciais de ordem fracionária, cujo poder de generalização de modelos é um considerável atrativo.

Existem muitos trabalhos na literatura sobre modelos de dispersão de contaminantes na CLP. Em 2006, um modelo matemático de estado estacionário bidimensional foi desenvolvido por Sharan e Modani [2] para um poluente liberado a partir de uma fonte elevada, parametrizando o coeficiente de difusão da turbulência vertical como uma forma funcional generalizada de distância de vento (a partir da fonte), e a velocidade do vento como função de lei de potências da altura, a partir do solo. O modelo desenvolvido foi validado com os conjuntos de dados obtidos na parte Norte de Copenhague e do EPRI (Instituto de Pesquisa de Energia Elétrica), experiência de campo conduzida em Kincaid em condições instáveis. Em condições estáveis, o desempenho do modelo foi analisado com o conjunto de dados obtido na grade de difusão de Hanford. O modelo apresenta uma boa performance com o modelo Gaussiano no caso de Copenhague e fornece uma previsão comparável para o conjunto de dados do EPRI. O modelo proposto também pode ser utilizado para calcular a distribuição de concentração de um poluente liberado a partir de uma fonte de linha infinita perpendicular à direção do vento médio.

Wortmann et al. [3] sugeriram uma nova abordagem analítica para a solução da equação de advecção-difusão para simular a dispersão de poluentes na camada limite planetária. O método consiste em resolver a equação de advecção-difusão (após transformação por uma transformada integral generalizada) pela técnica de Transformada de Laplace, com inversão analítica, vista como não-gaussiana. Não foram feitas aproximações neste sentido para obter uma solução exata, exceto para o erro de arredondamento. O modelo foi avaliado em condições moderadamente instáveis usando o experimento de Copenhague e apresentou resultados muito bons com os dados do experimento considerado.

Mais tarde, Moreira et al. [4] em 2009, apresentaram uma revisão das soluções GILTT (Técnica de Transformação da Integral de Laplace Generalizada) para as equações de advecção e difusão bidimensionais, dependentes do tempo, focando a aplicação na simulação de dispersão de poluentes na atmosfera, assumindo os modelos Fickiano e Contra-Gradiente para uma ampla classe de problemas. Além de simulações numéricas e comparações estatísticas com dados experimentais e resultados da literatura.

Recentemente, ao simular a dispersão superficial de contaminantes liberados por uma fonte

contínua e pontual, elevada em uma CLP, Sastre [5] utilizou os modelos de dispersão Euleriano e Gaussiano os quais mostraram um comportamento mais suavizado para a concentração adimensional integrada lateralmente no nível do solo, quando comparados com o Experimento de Tanque. Isso é fundamental na hora de definir a localização de fábricas e indústrias (fontes de emissão de contaminantes) próximas a centros urbanos. Moreira et al. [6] apresentaram uma solução para a equação de difusão-advecção bidimensional estacionária para simular a dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária. A solução foi obtida através do método ADMM (Analytical Dispersion Multilayer Model) e da técnica de inversão numérica utilizando o algoritmo de Fixed Talbot. A validação da solução foi comprovada, mediante os parâmetros estatísticos segundo Hanna [7], através do confronto das concentrações calculadas a partir do modelo com as obtidas experimentalmente pelo experimento de Praire Grass. Os melhores resultados foram alcançados com a utilização dos coeficientes de difusão considerando a distância longitudinal da fonte e a altura vertical. No Egito, Marrouf [8] desenvolveu um modelo analítico para as concentrações lateralmente integradas, liberadas de uma fonte pontual em uma zona de inversão, este modelo foi formulado considerando a velocidade do vento como um perfil linear de altura vertical e a difusividade turbulenta como um perfil de lei de potências da altura vertical, a técnica de separação de variáveis foi usada para resolver a equação de advecção-difusão. O modelo analítico foi comparado com dados coletados de nove experimentos realizados em Inshas, Cairo (Egito). O modelo desenvolvido apresenta uma equiparação significativa entre a concentração observada e calculada. Já nos Estados Unidos, Huang [9], formulou um modelo de difusão não gaussiano generalizado para fluxo de cisalhamento turbulento com base na teoria estatística e na teoria K. Métodos analíticos foram desenvolvidos para avaliar parâmetros de difusão que são obtidos a partir da teoria de similaridade de Monin-Obukhov para a Camada Limite Planetária. As distribuições de concentração previstas pela teoria estiveram em excelente concordância com as observações. Degrazia et al. [10], apresentou um modelo que descreve a dispersão de poluentes em diversas condições de estabilidade atmosférica e que pode ser utilizado para modelar a concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais na CLP. Ele derivou os coeficientes de difusão turbulentos, para uma turbulência gerada por efeitos térmicos e mecânicos, esses coeficientes são empregados no modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição para simular as concentrações dos experimentos de Copenhagen, Praire-Grass e Kinkaid. Os conjuntos de dados dos experimentos e os presentes na literatura foram comparados concluindo que o modelo de dispersão Euleriano fornece os melhores resultados para Copenhagen e Praire-Grass porque os parâmetros físicos que descrevem o campo turbulento variam com a altura (a altura da CLP é discretizada em N subintervalos), assim, o modelo também pode ser usado em condições de inhomogeneidade da turbulência, enquanto os modelos gaussianos valem somente para condições homogêneas

e estacionárias da turbulência. Pereira [11], utilizou o modelo Euleriano na determinação da concentração de poluentes na CLP para condições instáveis, e assimilou através do EKF os dados coletados no experimento de Copenhagen. Com o objetivo de avaliar a assimilação de dados sintéticos com diferentes amostragens na coordenada horizontal (x) e com diferentes distribuições nos níveis verticais do modelo através do erro quadrático médio (NMSE), conseguiu observar que o EKF é eficiente em corrigir a trajetória do modelo nos pontos de inserção dos dados, mas há uma forte descontinuidade devido a pouca quantidade de dados assimilados. Venzke [12], apresentou uma aplicação do método ADMM onde foi encontrada uma solução semianalítica para a equação de difusão advecção com fechamento não Fickiano, o que fez gerar um termo a mais na equação, assim, além da turbulência atmosférica ser parametrizada pelo coeficiente de difusão, um termo de contragradiente na equação faz com que a turbulência seja analisada de forma mais ampla. O modelo simulou satisfatoriamente as concentrações observadas, produzindo conformidade entre as concentrações medidas e geradas, na maioria dos testes realizados. O modelo que levou em conta o termo adicional do contragradiente teve um melhor desempenho quando comparado com os resultados do modelo que desconsiderou este termo. Rui [13], estudou e analisou a dispersão de poluentes considerando a velocidade de deposição seca no solo e o decaimento da concentração de contaminante nas diferentes classes de estabilidade na CLP. A equação de difusão-advecção então descreve a deposição seca como uma condição de contorno de fluxo não nulo no solo. O modelo foi validado a partir do experimento de Hanford, obtendo resultados satisfatórios e pôde-se concluir que a deposição seca é um fenômeno local que influencia fortemente a distribuição das concentrações de poluição do ar e as concentrações máximas próximas ao solo.

Em se tratando de modelos Lagrangeanos, Carvalho [14] propôs um modelo semi-analítico de partículas lagrangeanas para simular a dispersão de poluentes durante condições de baixa velocidade do vento. O método baseia-se numa equação integral estocástica cuja solução é obtida pelo método ILS, que consiste na solução iterativa da equação de Langevin pelo método de iteração de Picard. Para considerar o efeito da baixa velocidade do vento, a solução para as componentes horizontais da velocidade turbulenta leva em conta a função de autocorrelação euleriana sugerida por Frenkiel [15]. Os resultados do modelo concordam muito bem com os dados de traçadores de campo coletados em condições estáveis ??no Laboratório Nacional de Engenharia de Idaho (INEL) e durante as condições convectivas da série de experimentos de campo no Instituto de Tecnologia da Índia (IIT). Uma análise estatística revela que o modelo simula muito bem os dados experimentais e apresenta resultados comparáveis aos obtidos com outros modelos utilizados como comparação. A característica analítica do método ILS e a inclusão da função de autocorrelação euleriana sugerida por Frenkiel [15] permitem gerar resultados mais precisos.

Um estudo da modelagem de bioconversão de glicerol em 1,3-propanodiol utilizando derivadas de ordem fracionárias [16], é um exemplo das inúmeras aplicações do cálculo fracionário. Foi proposto um modelo de balanço de massa que leva em consideração aspectos da memória, herdados da dinâmica fracionária proposta e foram obtidos melhores resultados na conversão de glicerol em 1,3-propanodiol, dados os conjuntos de parâmetros usados.

Já no campo da difusão anômala, o cálculo fracionário foi utilizado a fim de compreender suas aplicações num contexto onde reina um comportamento não convencional [17]. Silva [18] procurou soluções exatas para a equação de difusão fracionária, em dois contextos gerais, o primeiro considera um sistema infinito com simetria radial, tanto na presença de fontes quanto na ausência desses termos, para uma situação descrita por uma equação não linear. Já no segundo contexto, a equação de difusão fracionária foi resolvido para um sistema limitado por duas superfícies cilíndricas onde as paredes apresentam condições de contorno não homogêneas. A solução da equação de difusão fracionária satisfaz as condições de contorno apropriada e quando o parâmetro $\alpha = 1$ a solução da equação fracionária radial se reduz à solução padrão. Os aspectos surpreendentes dos resultados são a universalidade latente das equações, onde a variação da concentração depende somente dos parâmetros adimensional $\beta = \frac{Dt^\alpha}{R^2}$, onde D é o coeficiente de difusão, R o raio do cilindro e α , o parâmetro que descreve a difusão fracionária. Os resultados permitem concluir que a concentração, como função da distância, a quantidade total da substância difundida e o segundo momento da concentração, todos eles exibem um comportamento universal em termos do parâmetro adimensional β . Pfaffenzeller [19], aplicou o ferramental baseado em equações diferenciais de ordem fracionárias para a modelagem de sistemas de engenharia química. Foram estudadas e aplicadas técnicas numéricas para problemas relacionados à sistemas de geometria radial. Em seguida, a mistura de sólidos e a dispersão axial foram analisadas a partir do cálculo fracionário a fim de fazer um comparativo com as equações de ordem inteira. Em ambos os estudos, mistura de sólidos e dispersão axial, o modelo fracionário levou à menores valores da função objetivo usada para estimação de parâmetros. O ajuste dos pontos experimentais mostrou-se melhor pelo modelo fracionário, o que indica a viabilidade do uso de equações diferenciais fracionárias para a modelagem de sistemas de engenharia química.

Neste trabalho partimos dos princípios do cálculo clássico para investigar o potencial do cálculo fracionário no estudo da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária, mais precisamente na Camada Limite Convectiva. Comparamos os resultados obtidos com os dados do conhecido experimento de Copenhagen, a fim de verificar se o uso do cálculo fracionário se destaca quanto a aprimoração dos resultados.

Esta dissertação está organizada em seis capítulos onde o segundo trata dos objetivos que levaram a realização da pesquisa. No terceiro capítulo apresenta-se uma descrição teorizada sobre a Camada Limite Convectiva que é o campo de estudo do presente trabalho e também

uma breve explicação das técnicas do Cálculo Fracionário, ferramental bastante presente nas soluções da equação de dispersão. No quarto capítulo apresentamos a Modelagem Matemática a partir do modelo de dispersão Euleriano clássico e as possíveis generalizações para modelos fracionários. No quinto capítulo analisamos a performance dos modelos estudados em comparação com o experimento de Copenhague e os resultados obtidos, e no sexto capítulo apresentamos as conclusões e propostas para trabalhos futuros.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Apresentar uma proposta de modelagem da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária, a partir do emprego de equações diferenciais de ordem fracionária que generalizam as equações 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.

Comparar os resultados obtidos, a partir da implementação das equações, com os dados do experimento de Copenhague.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 Camada Limite Planetária

A Camada Limite Planetária - CLP, vista também na literatura como Camada Limite Atmosférica - CLA, é a parcela da atmosfera que se encontra mais próxima da superfície da terra. Sua particularidade é ser a região atmosférica caracterizada pela existência de turbulência [20]. O escoamento turbulento é aquele no qual as flutuações das variáveis que descrevem o escoamento são amplificadas no tempo e no espaço [21].

De acordo com Stull [22], a espessura da CLP varia de 100 a 3 mil metros de altura a partir da superfície terrestre. A espessura da CLP sobre regiões terrenas sofre bastante variação com a latitude, o ciclo das estações e a intercalação entre dia e noite. Já sobre os oceanos essa variação é bem menor, pois a capacidade térmica da água é alta, isso implica na baixa variação de temperatura da água do mar, diminuindo a influência de um dos principais forçantes da superfície sobre a CLP. Na figura abaixo, pode-se observar os fenômenos que ocorrem na CLP durante o dia bem como a formação de diferentes camadas conforme a incidência de radiação solar.

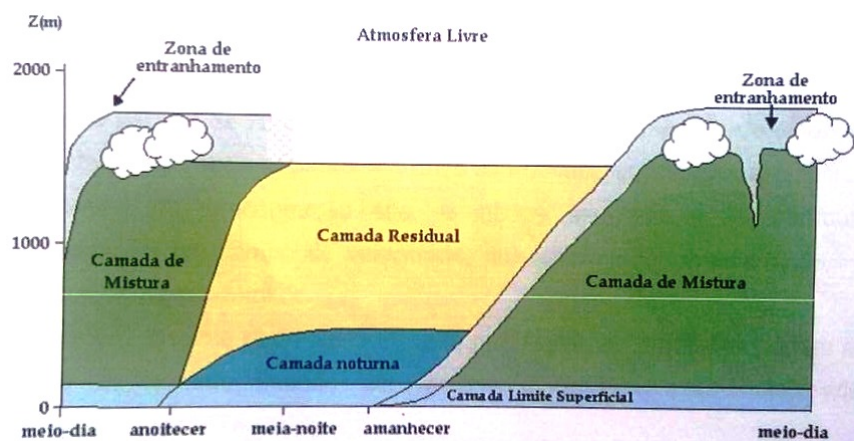


Figura 1: Camada Limite Planetária. Adaptado de Stull (1988)

Com o nascer do sol ocorre o processo de aquecimento da superfície pela radiação incidente de onda curta. A atmosfera é semi-transparente a este intervalo de frequências do espectro eletromagnético, portanto não é a radiação incidente que aquece diretamente a CLP mas sim a radiação absorvida pela superfície terrestre e reemitida para a atmosfera. A partir desse aquecimento começa a se formar a Camada Limite Convectiva (CLC). Esta camada vai crescendo com o passar da manhã e atinge o seu valor máximo por volta do meio-dia. Esta estrutura se mantém até o momento em que começa a diminuir a incidência de radiação solar e a temperatura começa a decair. Com isso, no pôr do sol, a CLC deixa de existir e em seu lugar começa a se formar uma camada Limite Estável a CLE.

Acima da CLE, caracterizada por uma estratificação térmica, se forma uma camada onde ocorre o decaimento da turbulência convectiva. Esta camada, que pode ser chamada de "pré-residual", se mantém por aproximadamente uma hora após o pôr do sol. Depois deste período surge a Camada Limite Residual (CR), que se mantém até o amanhecer. Na CR as principais fontes de turbulência são de origem mecânica e a partir de ondas de gravidade [22].

Estudar os fenômenos e toda a CLP tornaria o trabalho bastante abrangente, já que os eventos que nela ocorre variam com o tempo, temperatura, perfil de vento médio e outros forçantes. Neste trabalho será considerado como ambiente de estudo somente a a Camada Limite Convectiva.

3.1.1 Camada Limite Convectiva

Transferência de calor a partir do solo e resfriamento radiativo das nuvens no topo da camada limite são situações que criam o ambiente ideal para formação de turbulência. A primeira situação cria termas de ar aquecido pela radiação solar incidente na superfície terrestre enquanto a segunda cria termas de ar frio acima. A ocorrência simultânea desses acontecimentos provoca a turbulência já que a camada de ar próxima ao solo é aquecida, diminuindo sua densidade e fazendo-a subir, indo de encontro às termas de ar frio que por serem mais densas acabam deslocando-se para baixo. Estes movimentos convectivos bem organizados provocam uma forte mistura vertical que é chamada de turbulência convectiva. Já a turbulência mecânica ocorre com o cisalhamento do vento na superfície, por isso aparece nas partes mais inferiores da CLP. Tudo isso ocorre no período de maior incidência solar formando a Camada Limite Convectiva – CLC. Esta camada se estende do solo $z = 0$, até a base da primeira inversão $z = z_i$ que é a altura da camada limite convectiva.

A CLC ainda pode ser subdividida em outras três camadas

– A *Camada Superficial*, que abrange cerca de 10% da Camada Limite Planetária, a partir da superfície da Terra. Tem como parâmetro de avaliação do grau de estabilidade atmosférica o

comprimento de Monin-Obukhov (L), que expressa a relação entre os fluxos turbulentos de origem mecânica e convectiva. O comprimento de Monin-Obukhov (L) é a altura na qual a intensidade da turbulência mecânica predomina em relação á intensidade da turbulência de origem térmica. O comprimento de Monin-Obukhov (L) é definido como

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

onde u_* é a velocidade de atrito; κ é a constante de Von Karman [23; 24; 25]; g é a aceleração da gravidade; ϑ é a temperatura potencial média; e $\overline{w\theta}$ é o fluxo de calor sensível;

– A *Zona de Entranhamento*, onde o fluxo de calor é negativo e onde o ar da atmosfera livre se entranha na camada de mistura, na qual ocorre a transição entre as condições médias das variáveis na Camada Limite Convectiva e as condições laminares na atmosfera livre;

– A *Camada de Mistura*, região compreendida entre $0,1z_i < z < z_i$, correspondente a maior parte da CLC, onde ocorre a grande mistura turbulenta devido ao efeito da convecção térmica diurna, os perfis verticais de temperatura e velocidade dos ventos nessa camada podem ser considerados constantes.

Seibert et al. [26] adotaram a seguinte definição para a altura da camada de mistura turbulenta: "É a altura da camada adjacente à superfície em que poluentes ou alguns constituintes emitidos ou entranhados nesta camada tornam-se misturados por turbulência mecânica ou convectiva em uma escala de tempo de uma hora ou menos."

3.2 Cálculo Fracionário

O cálculo fracionário, que tem por objetivo estudar integrais e derivadas de ordens não inteiras, avançou de forma significativa, por permitir modelar diversos fenômenos naturais e já apresenta resultados importantes em diversas áreas do conhecimento, tais como: mecânica dos fluidos, fenômenos de transporte, redes elétricas, probabilidade e biomatemática [27; 28; 29].

A principal vantagem em se trabalhar com o cálculo fracionário é a possibilidade de expansão das operações de derivação e integração de ordem inteira para ordens arbitrárias (reais ou complexas). Ao longo dos anos, muitos problemas da física e matemática têm sido generalizados com o cálculo fracionário, visto que garante uma maior e mais precisa estimativa de parâmetros. Dentre os trabalhos na área podemos citar o estudo de problemas difusivos [30], o estudo do cálculo variacional [31], de teoria cinética [32], da mecânica dos fluidos [33] e do processamento de sinais [34].

A teoria das derivadas de ordem não-inteira ou ordem fracionária remete a Leibnitz em 1695

quando, em uma carta escrita a L'Hospital questionou o significado da derivada de ordem meia $\frac{1}{2}$ [35]. A partir desta carta, começou a se discutir o conceito de derivadas e integrais de ordem arbitrária, que durante três séculos foi tratada como um campo da matemática puramente teórico [36]. A fundamentação desta teoria tomou forma no final do século XIX, devido à contribuição de excelentes matemáticos como Euler, Lagrange, Laplace, Fourier, Abel, Heaviside, Liouville, Grünwald, Letnikov e Riemann que através de seus estudos discutiram as primeiras definições concretas de derivadas e integrais de ordem não inteira.

Já no século seguinte, a partir e durante a década de 60, apesar do surgimento de novas teorias, o cerne principal das pesquisas era a aplicação do ferramental utilizado principalmente nas ciências experimentais, buscando aproximações de descrição matemática para sistemas poliméricos, eletroquímicos, biológicos, bem como a descrição de fenômenos de transporte e o desenvolvimento de técnicas de controle de processos [35]. Até o final do século passado o desenvolvimento do cálculo fracionário deu-se estritamente no campo da matemática pura, sem grandes aplicações em outras áreas.

A principal vantagem das derivadas de ordem fracionária em comparação com as derivadas de ordem inteira são as propriedades de memória dos materiais e processos. Nas derivadas de ordem inteira esses efeitos são postergados. Um operador de ordem inteira é somente um operador local, enquanto um operador fracionário é um operador não-local, a propriedade de não-localidade de um operador consiste do fato de 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 [37].

Em 1730, Euler formulou uma das mais antigas definições do Cálculo Fracionário. Ele generalizou a fórmula

$$\frac{d^n x^m}{dx^n} = \frac{m!}{(m-n)!} x^{m-n} \quad (2)$$

para m e n inteiros com $m > n$, substituindo m e n por números reais β e α , e os fatoriais por funções Gamma:

$$\frac{d^\alpha x^\beta}{dx^\alpha} = \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta-\alpha+1)} x^{\beta-\alpha}, \quad (3)$$

onde a função $\Gamma(z)$

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt \quad (4)$$

generaliza a função fatorial para números não inteiros (para $z = m + 1$ inteiro, temos $\Gamma(m+1) = m!$). A definição de Euler é a definição mais simples para a derivada fracionária, porém é a mais restritiva, pois só se aplica a funções analíticas.

A definição de derivada fracionária de Grünwald-Letnikov é vista como uma generalização para a derivada de ordem inteira, pois é baseada na noção usual de derivada como um limite

da variação da função. De acordo com Grunwald-Letnikov, a derivada de ordem $\alpha \in \mathbb{R}$ é definida pelo limite:

$$\frac{d^\alpha f(x)}{dx^\alpha} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \binom{\alpha}{m} f(x + (\alpha - m)h), \quad (5)$$

que é obtido através da continuação analítica da definição usual de derivada. Esta definição é pouco utilizada pois é difícil até mesmo para funções simples.

Para os problemas analíticos, existem duas formulações bastante populares entre os matemáticos: a definição de Caputo de 1969

$$\frac{d^\alpha y}{dx^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_a^x \frac{1}{(x - t)^{\alpha - n + 1}} \frac{d^n y(t)}{dt^n} dt, \quad (6)$$

que é mais restritiva pois requer condições de contorno regulares (bastante semelhantes às derivadas usuais de ordem inteira) e é a formulação mais utilizada em ciências em geral [38].

E a definição de Riemann-Liouville [39; 40; 41; 42]

$$\frac{d^\alpha y}{dx^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_a^x \frac{y(t)}{(x - t)^{\alpha - n + 1}} dt, \quad (7)$$

onde $n \leq \alpha < n + 1$ é um número inteiro e a um número real arbitrário [35]. Ambas as formulações serão definidas nas seções a seguir.

3.2.1 Derivada de Riemann-Liouville

O cálculo fracionário de Riemann-Liouville é a formulação mais popular entre os matemáticos, muitas outras formulações de derivadas fracionárias são variantes da formulação de Riemann-Liouville, um grande número dessas formulações estão de alguma forma conectadas com a continuação analítica de Cauchy para integrais repetidas.

Teorema 1 (Fórmula de Cauchy). *Seja $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função integrável segundo Riemann no intervalo $[a, b]$. Então, temos para a integral de ordem n , ($n \in \mathbb{N}$):*

$$\begin{aligned} \int_a^x f(\tilde{x})(d\tilde{x})^n &= \int_a^x \int_a^{x_n} \int_a^{x_{n-1}} \cdots \int_a^{x_3} \int_a^{x_2} f(x_1) dx_1 dx_2 \cdots dx_{n-1} dx_n \\ &= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_a^x \frac{f(u)}{(x - u)^{1-n}} du \quad (n \in \mathbb{N}), \end{aligned}$$

onde Γ é a função Gamma de Euler [43].

As integrais fracionárias obtidas a partir desta fórmula são chamadas integrais à direita e à

esquerda de Riemman-Liouville. A definição de Derivada de Riemann-Liouville está baseada no fato de a derivada ser a operação inversa da integração e também na lei dos expoentes. Determina-se aqui que a derivada de ordem fracionária é a derivada de ordem inteira de uma integral de ordem fracionária. A maioria dos processos dinâmicos não permite descontinuidades e a compreensão deste fato é importante para a aplicação adequada dos métodos de cálculo fracionário [35]. Para o estudo das derivadas de Riemann-Liouville é importante definir os operadores ${}_a J_x^\alpha$ e ${}_x J_b^\alpha$ de ordem não inteira (ou fracionária), definidos por:

$${}_a J_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{f(u)}{(x-u)^{1-\alpha}} du \quad (\alpha \in \mathbb{R}_+) \quad (8)$$

e

$${}_x J_b^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b \frac{f(u)}{(u-x)^{1-\alpha}} du \quad (\alpha \in \mathbb{R}_+), \quad (9)$$

com $a < b$ e $a, b \in \mathbb{R}$. Estes operadores integrais são historicamente definidos como operadores pela esquerda e pela direita das integrais de Riemann-Liouville, de ordem $\alpha \in \mathbb{R}_+$, respectivamente.

É importante colocar que para α inteiro, as integrais de Riemann-Liouville (8) e (9) coincidem com integrais repetidas usuais. Além do mais, as integrais fracionárias de Riemann-Liouville convergem para quaisquer funções integráveis f , se $\alpha > 1$.

As derivadas fracionárias de ordem $\alpha > 0$ com $\alpha \in \mathbb{R}$ de Riemann-Liouville à esquerda e direita são definidas respectivamente por ${}^R D_x^\alpha f(x) = D_{x^+}^n J_x^{n-\alpha} f(x)$ e ${}^R D_b^\alpha f(x) = (-1)^n D_{x^-}^n J_b^{n-\alpha} f(x)$ com $n = [\alpha] + 1$, onde $[\alpha]$ é a parte inteira do número α . Assim:

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

e

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

onde $D_x^n = \frac{d^n}{dx^n}$ é uma derivada usual de ordem inteira n [27].

3.2.2 Derivada de Caputo

A derivada fracionária de Caputo é definida de maneira bastante similar á de Riemann-Liouville, mas nesta se inverte a ordem de integração fracionária com a ordem de derivação.

$${}^C D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_a^x \frac{f^{(n)}(u)}{(x - u)^{1+\alpha-n}} du \quad (n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+, a \in \mathbb{R}) \quad (12)$$

e

$${}^C D_b^\alpha f(x) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n - \alpha)} \int_x^b \frac{f^{(n)}(u)}{(u - x)^{1+\alpha-n}} du \quad (n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+, b \in \mathbb{R}) \quad (13)$$

Esta definição é mais restritiva do que a de Riemann-Liouville, pois requer a integrabilidade da derivada de ordem n da função [28]. A definição de Caputo para as derivadas fracionárias oferece uma vantagem em relação a outras definições visto que as condições iniciais para a solução das equações diferenciais fracionárias são de ordem inteira, possibilitando melhor interpretação física [35].

Além disso, uma diferença importante entre a aproximação de Riemann-Liouville e Caputo é que na aproximação de Caputo a derivada de uma função constante é igual a zero. Partindo da interpretação física da derivada de constante ser nula, alguns autores julgam que a derivada de Caputo para um problema de valor inicial, tem uma interpretação mais simples que a de Riemann-Liouville [28].

O operador fracionário de Caputo oferece melhorias na solução de problemas físicos já que permite uma abordagem significativa quanto à solução de equações diferenciais fracionárias. Isto está ligado diretamente à existência de constantes de integração determinadas pelas condições iniciais e de contorno do problema. Essas condições impostas sobre o problema podem ser escritas como derivadas de ordem inteira (incluindo a derivada de ordem zero, que é a própria função), facilitando a interpretação física do problema [27].

4 MODELAGEM MATEMÁTICA

4.1 Modelo de Dispersão Euleriano Clássico

O estudo do transporte de poluentes na atmosfera pode ser realizado através do modelo de dispersão Euleriano, que é descrito pela equação de difusão-advecção. Para um sistema de coordenadas cartesianas em que a direção x coincide com a direção do vento médio, a equação de difusão-advecção no estado estacionário é escrita como [44]

$$U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}(\overline{u'c'}) - \frac{\partial}{\partial y}(\overline{v'c'}) - \frac{\partial}{\partial z}(\overline{w'c'}) \quad (14)$$

onde \bar{c} representa a concentração média de contaminantes, U é a componente do vento médio na direção x e $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$, $\overline{w'c'}$ representam os fluxos turbulentos de contaminantes nas direções longitudinal, lateral e vertical, respectivamente. A equação (14) possui quatro variáveis e, portanto não pode ser resolvida como se apresenta. O problema é resolvido considerando uma parametrização para os fluxos turbulentos. A hipótese é que os fluxos turbulentos sejam proporcionais ao gradiente da concentração média. A constante de proporcionalidade é denominada coeficiente de difusão. O coeficiente de difusão está relacionado com a estrutura física do fluxo turbulento. Assim,

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (15)$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \quad (16)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (17)$$

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão nas direções x , y e z , respectivamente. Substituindo as relações (15), (16) e (17) na equação (14), obtemos:

$$U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}) \quad (18)$$

Integrando-se a equação (18) em relação a y e ainda desprezando-se a difusão longitudinal, considerando que o transporte de contaminantes através da advecção é muito mais intenso do que o transporte por difusão devido a velocidade média advectiva U ser muito maior que a componente velocidade turbulenta u' , obtemos

$$U \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z}) \quad (19)$$

onde \bar{c}^y representa a concentração média integrada lateralmente. A expressão (19) está sujeita às condições de contorno de fluxo zero no solo e no topo da CLC (em $z = 0$ e z_i), e uma fonte com taxa de emissão Q na altura H_s :

$$K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} = 0 \quad (20)$$

$$U \bar{c}^y(0, z) = Q \delta(z_0 - H_s) \quad (21)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade da superfície, h é a altura da CLC e $\delta(\cdot)$ é a função Delta de Dirac.

4.2 Modelo de Dispersão Euleriano Fracionário

Um processo governado pelo regime de estado estacionário da equação (19), com K_z constante é chamado de processo Gaussiano, uma vez que para condições de fronteira particulares, a solução da equação de difusão decai exponencialmente com a posição x .

A distribuição Gaussiana para a concentração de contaminantes (19) é característica de um processo difusivo normal, exibindo um deslocamento quadrático médio linear com a posição [45]. Isto é facilmente observado aplicando uma Transformada de Fourier na variável z na equação (19) e calculando o deslocamento quadrático médio na solução da equação obtida. Uma característica de um processo de difusão anômala é que o deslocamento quadrático médio segue uma lei de potência $\langle z^2 \rangle \propto x^\alpha$ onde $0 < \alpha < 1$ [45]. Para que o deslocamento quadrático médio do processo de difusão analisado obedeça a uma lei de potência x^α é necessário que a equação diferencial para a concentração seja de ordem α na variável x [39; 43].

A distribuição espacial da concentração de um poluente não reativo na CLC é regida por equações dentre as quais uma delas pode ser obtida pela aplicação do princípio de continuidade e conservação de massa, onde os fluxos são representados pela Teoria K [46; 44].

Em um sistema de Coordenadas Cartesianas no qual a direção longitudinal coincide com a velocidade média do vento, em um estado estacionário, propõe-se um modelo onde a distribuição espacial da concentração de uma substância não reativa pode ser expressa por uma equação diferencial parcial fracionária. O modelo é obtido substituindo a tradicional derivada de primeira ordem (coordenada x) por uma derivada de Caputo de ordem fracionária α ($0 \leq \alpha \leq 1$).

$$u \frac{\partial^\alpha \bar{c}}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}), \quad (22)$$

onde $\bar{c} = \bar{c}(x, y, z)$ é a concentração média, $u = u(z)$ é a velocidade média do vento na direção longitudinal e K_x, K_y, K_z são os coeficientes de difusão. Também podemos considerar um modelo geral onde todas as derivadas em x, y e z são substituídas por derivadas fracionárias de ordem α, β e γ , respectivamente.

Considerando que um dos objetivos do presente trabalho é a investigação do potencial das equações diferenciais de ordem fracionária para modelagem de difusão de poluentes, espera-se que o modelo de dispersão Euleriano fracionário descreva melhor os dados experimentais, o modelo mais simples (22) é o mais adequado devido a simplicidade de se obter e analisar as soluções. É importante também enfatizar que optamos pelas derivadas fracionárias de Caputo ao invés das derivadas fracionárias de Riemann-Liouville, ${}^{RL}D_x^\alpha$ e ${}^{RL}D_b^\alpha$, pois as duas aparecem naturalmente nas equações de difusão anômalas [45] estão diretamente relacionadas pelas expressões abaixo (para $0 < \alpha < 1$) [40; 42]

$${}^C D_a^\alpha f(x) = {}^{RL} D_a^\alpha f(x) - \frac{f(a)}{\Gamma(1-\alpha)} (x-a)^{-\alpha} \quad (23)$$

e

$${}^C D_b^\alpha f(x) = {}^{RL} D_b^\alpha f(x) - \frac{f(b)}{\Gamma(1-\alpha)} (b-x)^{-\alpha}. \quad (24)$$

e, o mais importante para a proposta deste trabalho, que é de investigar o modelo fracionário mais simples possível, enquanto as equações diferenciais contendo Derivadas de Caputo requerem condições físicas de contorno regulares, as equações diferenciais com Derivadas de Riemann-Liouville requerem condições de contorno não-regulares, que são muito mais difíceis de implementar e justificar fisicamente [40; 42].

A equação de concentração lateralmente integrada ($\bar{c}^y = \bar{c}^y(x, z)$) é obtida integrando-se a equação (22) em relação a y de $-\infty$ a $+\infty$ (desconsiderando a difusão longitudinal).

$$u \frac{\partial^\alpha \bar{c}^y}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z}). \quad (25)$$

Nos modelos tradicionais de dispersão atmosférica a parametrização da turbulência é relacionada com o cálculo da velocidade do vento médio e o coeficiente de difusão [2; 47]. A velocidade do vento é obtida através da teoria da similaridade [48; 49; 50] o coeficiente de difusão é obtido empiricamente ou pela teoria de difusão estatística de Taylor [1; 51]. Neste trabalho utiliza-se a lei de potência para a velocidade do vento médio [50; 49]

$$u(z) = \gamma z^k, \quad \gamma = \frac{u(z_1)}{z_1^k} \quad (26)$$

onde $u(z_1)$ é a velocidade do vento em uma altura conhecida z_1 e k é o expoente dependente na intensidade da turbulência. Com o intuito de obter uma solução simples analítica para a equação (25), o coeficiente de difusão pode ser especificado como uma função de distância da direção do vento. Consideramos aqui dois casos importantes. O primeiro é quando ambos $u(z) = u(z_1) = u$ ($k = 0$ em (26)) e $K_z = K$ são constantes. Nesse caso temos uma generalização fracionária do modelo Gaussiano, que vamos chamar de Modelo α -Gaussiano,

$$u \frac{\partial^\alpha \bar{c}^y}{\partial x^\alpha} = K \frac{\partial^2 \bar{c}^y}{\partial z^2}. \quad (27)$$

O segundo caso é uma generalização fracionária do modelo proposto por Sharan e Modani (Modelo SM) [2], onde agora temos

$$K_z = K(x) = \rho x^\alpha, \quad \rho = \nu u. \quad (28)$$

Em (28) $\nu = \left(\frac{\sigma_w}{u}\right)^2$ é um parâmetro que está relacionado com a intensidade da turbulência [44], onde σ_w é o desvio padrão da componente vertical da velocidade do vento e $0 < \alpha < 1$ é uma constante, a mesma para a ordem das derivadas fracionárias em (25). Substituindo (26) e (28) em (25) definimos o Modelo α -SM

$$\gamma z^k \frac{\partial^\alpha \bar{c}^y}{\partial x^\alpha} = \rho x^\alpha \frac{\partial^2 \bar{c}^y}{\partial z^2}. \quad (29)$$

É importante salientar que o coeficiente de difusão $K_z = K(x) = \rho x$ considerado no modelo SM [2] (e (28) no modelo α -SM) não é fisicamente significativo no contexto da difusão de poluentes em reais condições atmosféricas. Este coeficiente de difusão é apresentado em [2] apenas com a intenção de adaptar dados experimentais com uma clássica equação de difusão-advectação. Neste trabalho, analisamos o Modelo α -SM (29) com (28) apenas para investigar se existe alguma vantagem em relação ao modelo α -Gaussiano (27), considerando o coeficiente de difusão como uma função de coordenadas espaciais.

Sendo assim, para as equações (25), (27) e (29) descreverem um possível problema real de

dispersão na CLC, podemos impor condições de contorno de fluxo zero no solo ($z = z_0$) e no topo ($z = h$), e considerar que o poluente seja lançado de um ponto elevado H_s com uma taxa de emissão Q , ou seja,

$$K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} = 0, \quad z = z_0, \quad z = h, \quad (30)$$

$$u \bar{c}^y(0, z) = Q \delta(z - H_s), \quad x = 0, \quad (31)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade da superfície, h é a altura da CLC e $\delta(\cdot)$ é a função delta de Dirac.

Equações (27) e (29) podem ser analiticamente resolvidas usando a técnica de separação de variáveis. Começamos assumindo que ambas (27) e (29) têm uma solução na forma

$$\bar{c}^y(x, z) = X(x)Z(z). \quad (32)$$

Substituindo a equação (32) na equação (27), obtemos duas equações diferenciais nas variáveis X e Z , como vemos a seguir,

$${}^C D_x^\alpha X + \kappa \lambda^2 X = 0, \quad (33)$$

e

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \lambda^2 Z = 0. \quad (34)$$

onde $\kappa = \frac{K}{\gamma}$. Por outro lado, substituindo a equação (32) em (29) temos

$${}^C D_x^\alpha X + \tau \lambda^2 x^\alpha X = 0, \quad (35)$$

e

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \lambda^2 z^k Z = 0. \quad (36)$$

onde $\tau = \frac{\rho}{\gamma}$.

4.3 Modelo α -Gaussiano

Para resolver a equação (33) pelo método de Frobenius [52], consideramos a seguinte série de potências como solução geral

$$\begin{aligned} X(x^\alpha) &= \sum_{n=0}^{\infty} b_n \frac{x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} \\ &= \frac{b_0}{\Gamma[\beta]} x^p + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]}, \end{aligned} \quad (37)$$

onde $0 < \alpha < 1$, p e β são constantes. A convergência da série de potência foi verificada a partir do teste da razão e tem um raio de convergência muito maior do que as distâncias utilizadas no experimento de Copenhague. A derivada fracionária de Caputo para (37) é dada por,

$$\begin{aligned} {}_0^C D_x^\alpha X(x^\alpha) &= \frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_n}{\Gamma[n\alpha + \beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^{n\alpha+p} \\ &= \frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_n}{\Gamma[n\alpha + \beta]} \frac{\Gamma[n\alpha + p + 1]}{\Gamma[n\alpha + p - \alpha + 1]} x^{(n-1)\alpha+p}. \end{aligned} \quad (38)$$

Considerando $\beta = p + 1$ temos

$${}_0^C D_x^\alpha X(x^\alpha) = \frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b_{n+1}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} x^{n\alpha+p}, \quad (39)$$

onde,

$${}_0^C D_x^\alpha x^p = \begin{cases} 0, & p = 0 \\ \frac{\Gamma[p+1]}{\Gamma[p+1-\alpha]} x^{p-\alpha}, & 0 < p \leq 1. \end{cases} \quad (40)$$

É importante salientar que se $p < 0$, a função $\frac{dx^p}{dx}$, e, conseqüentemente, a função $\frac{dX(x^\alpha)}{dx}$, não são integráveis e a derivada fracionária de Caputo não está definida. Substituindo a equação (39) na equação (33), obtemos

$$\frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \sum_{n=0}^{\infty} [b_{n+1} + \kappa\lambda^2 b_n] \frac{x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} = 0. \quad (41)$$

Se $p \neq 0$ temos a solução trivial $X(x^\alpha) = 0$, desde que $b_0 \neq 0$, a função é não integrável (porque nesse caso $\beta = 0, -1, -2, \dots$ e $p = \beta - 1 < 0$ a fim de satisfazer (41)).

Para $p = 0$ temos a seguinte relação

$$b_{n+1} = -\kappa\lambda^2 b_n. \quad (42)$$

Seja (42) uma equação onde os valores de b estão diretamente relacionados aos valores que n assume, então para

$$\begin{aligned} n = 0 &\rightarrow b_1 = -\kappa\lambda^2 b_0; \\ n = 1 &\rightarrow b_2 = -\kappa\lambda^2 b_1 = -\kappa\lambda^2(-\kappa\lambda^2 b_0) = \kappa^2\lambda^4 b_0; \\ n = 2 &\rightarrow b_3 = -\kappa\lambda^2 b_2 = -\kappa\lambda^2(\kappa^2\lambda^4 b_0) = -\kappa^3\lambda^6 b_0; \\ n = 3 &\rightarrow b_4 = -\kappa\lambda^2 b_3 = -\kappa\lambda^2(-\kappa^3\lambda^6 b_0) = \kappa^4\lambda^8 b_0, \end{aligned} \quad (43)$$

sendo assim os valores de b em função de n são descritos por

$$b_n = (-\lambda^2)^n \kappa^n b_0 \quad (44)$$

Substituindo (44) em (37) temos a solução de (33)

$$\begin{aligned} X(x^\alpha) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-\lambda^2)^n \kappa^n \frac{b_0 x^{n\alpha}}{\Gamma[n\alpha + 1]} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b_0 (-\kappa \lambda^2 x^\alpha)^n}{\Gamma[n\alpha + 1]} \end{aligned} \quad (45)$$

Por outro lado, as soluções $Z_n(z)$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) da equação (34) que satisfazem as condições de fronteira (30) com $z_0 = 0$ são $Z_n(z) = B_n \cos(\lambda_n z)$ onde $\lambda_n = \frac{n\pi}{h}$, e B_n é uma constante. Um parâmetro a ser considerado é a função de Mittag-Leffler, uma generalização da função exponencial tida como solução de equações diferenciais fracionárias lineares com coeficientes constantes

$$E_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(n\alpha + 1)}. \quad (46)$$

Consequentemente, temos pelo princípio da sobreposição e pela (32)

$$\bar{c}^y(x, z) = B_0 + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos(\lambda_n z) E_\alpha(-\kappa \lambda_n^2 x^\alpha). \quad (47)$$

Finalmente, impondo as condições de fronteira (31), e usando a identidade

$$\delta(x - a) = \frac{1}{d} + \frac{2}{d} \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi a}{d}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{d}\right), \quad (48)$$

nós obtemos a equação

$$\bar{c}^y(x, z) = \frac{Q}{uh} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n H_s) \cos(\lambda_n z) E_\alpha(-\kappa \lambda_n^2 x^\alpha) \right], \quad (49)$$

onde $\lambda_n = \frac{n\pi}{h}$.

A solução para o modelo Gaussiano clássico é obtida a partir da equação (27), quando $\alpha = 1$ [46]

$$\bar{c}^y(x, z) = \frac{Q}{uh} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n H_s) \cos(\lambda_n z) \exp\left(-\kappa \lambda_n^2 x\right) \right]. \quad (50)$$

4.4 Modelo α -SM

A solução do modelo fracionário α -SM, (29):

$$\gamma z^k \frac{\partial^\alpha \bar{c}^y}{\partial x^\alpha} = \rho x^\alpha \frac{\partial^2 \bar{c}^y}{\partial z^2},$$

sujeito às condições de fronteira (30) e (31)

$$K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} = 0, \quad z = z_0, \quad z = h$$

$$u \bar{c}^y(0, z) = Q \delta(z - H_s), \quad x = 0,$$

pode ser obtida pelo método de Frobenius [52] e através da solução das equações (35) e (36):

$${}_a^C D_x^\alpha X + \tau \lambda^2 x^\alpha X = 0;$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \lambda^2 z^k Z = 0.$$

Substituindo as equações (39) e (37):

$${}_0^C D_x^\alpha X(x^\alpha) = \frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b_{n+1}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} x^{n\alpha+p}$$

$$X(x^\alpha) = \frac{b_0}{\Gamma[\beta]} x^p + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]},$$

em na equação diferencial (35)

$${}_a^C D_x^\alpha X + \tau \lambda^2 x^\alpha X = 0,$$

obtemos:

$$\frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b_{n+1} x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} + \tau \lambda^2 x^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b_n x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} = 0 \quad (51)$$

$$\frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \frac{b_1}{\Gamma[\beta]} x^p + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_{n+1} x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} + \tau \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b_n x^{(n+1)\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} = 0, \quad (52)$$

fazendo $n = n' - 1$,

$$\frac{b_0}{\Gamma[\beta]} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \frac{b_1}{\Gamma[\beta]} x^p + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_{n+1} x^{n\alpha+p}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} + \tau \lambda^2 \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{b_{n'-1} x^{(n')\alpha+p}}{\Gamma[(n'-1)\alpha + \beta]} = 0. \quad (53)$$

Para fins de cálculo, vamos considerar $n' = n$, assim:

$$\frac{b_0}{\Gamma(\beta)} {}_0^C D_x^\alpha x^p + \frac{b_1 x^p}{\Gamma(\beta)} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{b_{n+1}}{\Gamma[n\alpha + \beta]} + \tau \lambda^2 \frac{b_{n-1}}{\Gamma[(n-1)\alpha + \beta]} \right] x^{n\alpha+p} = 0. \quad (54)$$

Assim como no modelo α -Gaussiano, se $p \neq 0$, a derivada fracionária de Caputo para a função $X(x^\alpha)$ não está definida. Então, $p = 0$ e $\beta = 1$. Nesse caso, a equação (54) pode ser escrita como

$$\frac{b_1}{\Gamma(1)} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{b_{n+1}}{\Gamma[n\alpha + 1]} + \tau \lambda^2 \frac{b_{n-1}}{\Gamma[(n-1)\alpha + 1]} \right] x^{n\alpha} = 0. \quad (55)$$

Na equação (55), note como $b_1 = 0$ e

$$\frac{b_{n+1}}{\Gamma[n\alpha + 1]} + \frac{\tau \lambda^2 b_{n-1}}{\Gamma[(n-1)\alpha + 1]} = 0 \quad (56)$$

Assim, temos a relação

$$b_{n+1} = \frac{-\tau \lambda^2 \Gamma[n\alpha + 1]}{\Gamma[(n-1)\alpha + 1]} b_{n-1} \quad (57)$$

Para os valores que n assume, temos diferentes valores de b tal sejam

$$\begin{aligned} n = 1 &\rightarrow b_2 = \frac{-\tau \lambda^2 \Gamma[\alpha + 1]}{\Gamma[1]} b_0 \\ n = 2 &\rightarrow b_3 = \frac{-\tau \lambda^2 \Gamma[2\alpha + 1]}{\Gamma[\alpha + 1]} b_1 \quad b_1 = 0; \quad b_3 = 0; \\ n = 3 &\rightarrow b_4 = \frac{-\tau \lambda^2 \Gamma[3\alpha + 1]}{\Gamma[2\alpha + 1]} b_2 \quad \rightarrow b_4 = \tau^2 \lambda^4 \frac{\Gamma[3\alpha + 1] \Gamma[\alpha + 1]}{\Gamma[2\alpha + 1] \Gamma[1]} \\ n = 4 &\rightarrow b_5 = \frac{-\tau \lambda^2 \Gamma[4\alpha + 1]}{\Gamma[3\alpha + 1]} b_3 \quad b_3 = 0; \quad b_5 = 0; \\ n = 5 &\rightarrow b_6 = \frac{-\tau \lambda^2 \Gamma[5\alpha + 1]}{\Gamma[4\alpha + 1]} b_4 \quad \rightarrow b_6 = \tau^3 \lambda^6 \frac{\Gamma[5\alpha + 1] \Gamma[3\alpha + 1] \Gamma[\alpha + 1]}{\Gamma[4\alpha + 1] \Gamma[2\alpha + 1] \Gamma[1]} \end{aligned} \quad (58)$$

Podemos verificar que os termos ímpares, ou seja, todo termo b_{2n+1} é nulo, já os termos

pares são dados por

$$b_{2n} = \frac{(-1)^n \prod_{i=1}^n \Gamma[(2i-1)\alpha + 1]}{n \prod_{i=1}^n \Gamma[2(i-1)\alpha + 1]} (\tau \lambda^2)^n b_0. \quad (59)$$

Agora, substituindo (59) em (37), para $b_0 = 1$, $p = 0$ e $\beta = 1$, temos

$$X(x^\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\prod_{i=1}^n \Gamma((2i-1)\alpha + 1)}{n+1 \prod_{i=1}^n \Gamma(2(i-1)\alpha + 1)} (\tau \lambda^2 x^{2\alpha})^n. \quad (60)$$

Agora para a equação (36), consideramos a seguinte série de potências como solução analítica:

$$Z(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left(z^{1+\frac{k}{2}} \right)^{n+r}. \quad (61)$$

Substituindo (61) em (36) temos,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4}(2+k)r(-2+(2+k)r)c_0 \left(z^{1+\frac{k}{2}} \right)^{r-2} + \frac{1}{4}(2+k)(1+r)(k+(2+k)r)c_1 \left(z^{1+\frac{k}{2}} \right)^{r-1} + \\ & \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{4}(2+k)(2+n+r)(-2+(2+k)(n+2) + (2+k)r)c_{n+2} + \lambda^2 c_n \right] \left(z^{1+\frac{k}{2}} \right)^{n+r} = 0. \end{aligned} \quad (62)$$

Todos os coeficientes de potências $\left(z^{1+\frac{k}{2}} \right)^{n+r}$ devem ser igualados a zero para obter a solução. Isso implica dois casos. No primeiro caso ($c_1 = 0$ e $r = \frac{2}{2+k}$) a solução é dada por,

$$Z_1(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{1}{2}\right)^{2n+\frac{1}{2+k}} \left(\frac{2\lambda}{2+k}\right)^{2n+\frac{1}{2+k}}}{n! \Gamma\left(1 + \frac{1}{2+k} + n\right)} \left(z^{1+\frac{k}{2}} \right)^{2n+\frac{2}{2+k}} = z^{\frac{1}{2}} J_{\frac{1}{2+k}} \left(\frac{2\lambda}{2+k} z^{1+\frac{k}{2}} \right). \quad (63)$$

No segundo caso ($c_0 = 0$ e $r = -1$), a solução é

$$Z_2(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{1}{2}\right)^{2n-\frac{1}{2+k}} \left(\frac{2\lambda}{2+k}\right)^{2n-\frac{1}{2+k}}}{n! \Gamma\left(1 - \frac{1}{2+k} + n\right)} \left(z^{1+\frac{k}{2}} \right)^{2n-1} = z^{\frac{1}{2}} J_{-\frac{1}{2+k}} \left(\frac{2\lambda}{2+k} z^{1+\frac{k}{2}} \right). \quad (64)$$

Usando o princípio da sobreposição, temos

$$Z(z) = AZ_1(z) + BZ_2(z) = Az^{\frac{1}{2}} J_{\frac{1}{2+k}} \left(\frac{2\lambda}{2+k} z^{1+\frac{k}{2}} \right) + Bz^{\frac{1}{2}} J_{-\frac{1}{2+k}} \left(\frac{2\lambda}{2+k} z^{1+\frac{k}{2}} \right). \quad (65)$$

onde A e B são constantes. Consideramos $\mu = \frac{1}{2+k}$, então temos

$$Z(z) = Az^{\frac{1}{2}}J_{\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) + Bz^{\frac{1}{2}}J_{-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) \quad (66)$$

Aplicando as condições de fronteira dadas em (30), temos

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[z^{\frac{1}{2}}AJ_{\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) + z^{\frac{1}{2}}BJ_{-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) \right] = 0. \quad (67)$$

Resolvendo a equação diferencial parcial em relação a z , temos

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}z^{-\frac{1}{2}}AJ_{\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) + \frac{1}{2}z^{-\frac{1}{2}}BJ_{-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) + \\ & + Az^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{2}\lambda z^{-1+\frac{1}{2\mu}} (J_{-1+\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) - J_{1+\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}})) \right] + \\ & + Bz^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{2}\lambda z^{-1+\frac{1}{2\mu}} (J_{-1-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) - J_{1-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}})) \right] = 0 \\ & \frac{1}{2}\frac{A}{\sqrt{z}}J_{\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) + \frac{A\sqrt{z}}{2}\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}J_{-1+\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) - \frac{A\sqrt{z}}{2}\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}J_{1+\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) + \\ & + \frac{1}{2}\frac{B}{\sqrt{z}}J_{-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) + \frac{B\sqrt{z}}{2}\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}J_{-1-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) - \frac{B\sqrt{z}}{2}\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}J_{1-\mu}(2\mu\lambda z^{\frac{1}{2\mu}}) = 0 \end{aligned}$$

Ao aplicar as condições de fronteira $Z'(0) = 0$, deve-se considerar a condição de existência em $z = 0$. Se A for considerado uma constante $\neq 0$, todos os termos em A vão para infinito, não satisfazendo a condição de existência $z = 0$. Se assumirmos $A = 0$, todos os termos onde z é denominador serão iguais a zero. Para qualquer $0 < \mu < 1$ o limite quando z tende a zero é igual a zero, sendo assim, B pode assumir qualquer valor. Sendo assim, temos que

$$Z(z) = Bz^{\frac{1}{2}}J_{-\mu}(2\lambda\mu z^{\frac{1}{2\mu}}). \quad (68)$$

Aplicando as condições de fronteira $Z'(h) = 0$ (30), com $A = 0$, temos

$$\frac{1}{2}h^{-\frac{1}{2}}BJ_{-\mu}(2\lambda\mu h^{\frac{1}{2\mu}}) + \frac{1}{2}Bh^{\frac{1}{2}}\lambda \frac{h^{\frac{1}{2\mu}}}{h}J_{-1-\mu}(2\lambda\mu h^{\frac{1}{2\mu}}) - \frac{1}{2}Bh^{\frac{1}{2}}\lambda \frac{h^{\frac{1}{2\mu}}}{h}J_{1-\mu}(2\lambda\mu h^{\frac{1}{2\mu}}) = 0, \quad (69)$$

onde

$$\frac{1}{2}Bh^{\frac{1}{2}}\lambda \frac{h^{\frac{1}{2\mu}}}{h}J_{1-\mu}(2\lambda\mu h^{\frac{1}{2\mu}}) = 0$$

o que implica

$$J_{1-\mu}(2\lambda\mu h^{\frac{1}{2\mu}}) = 0 \quad (70)$$

Consequentemente, $\lambda = \lambda_n$ é dado pelos zeros da função Bessel de ordem $1 - \mu$.

Pelo principio da sobreposição, e pelas equações (32), (60) e (68), obtemos a solução de (29), que é a equação para a concentração lateralmente integrada do poluente não reativo na CLP, emitido a partir de um ponto elevado

$$\bar{c}^y(x, z) = B_0 + z^{\frac{1}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} B_n J_{-\mu}(2\lambda_n \mu z^{\frac{1}{2\mu}}) \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\prod_{i=1}^n \Gamma[(2i-1)\alpha + 1]}{\prod_{i=1}^{j+1} \Gamma[2(i-1)\alpha + 1]} (\tau \lambda_n^2 x^{2\alpha})^n. \quad (71)$$

A função (71) é a solução do modelo generalizado para a estimativa de concentração de poluente (29) e é obtida quando u e K_z são funções de z (26), (28).

As constantes B_0 e B_n são obtidas através da aplicação das condições de fronteira dadas por $u \bar{c}^y = Q\delta(z - H_s)$, (31), quando $x = 0$, na equação (71). Os valores numéricos de B_n são fixados como soluções constantes do sistema obtido através da integração da equação do solo até o topo, ou seja, para valores de 0 a h .

5 PERFORMANCE DOS MODELOS

A performance dos modelos de derivadas fracionárias expressos em (49) e (71) foram validados em comparação à concentração de um poluente não reativo utilizando-se dos dados do experimento de dispersão de Copenhagen. O experimento de Copenhagen ocorreu nos anos de 1978 e 1979, na cidade de Copenhagen, e arredores, na Dinamarca, sob condições de instabilidade atmosférica variando de moderada a forte. Este experimento foi realizado montando-se um sistema de emissão de hexafluoreto de enxofre (SF₆) em uma torre de televisão em Gladsaxe. O traçador foi definido sem flutuabilidade em uma altura (H_s) de 115, a área do experimento era predominantemente residencial, com uma altura de rugosidade média de 0.6 m. As taxas de emissão do traçador foram constantes ao longo de um período de amostragem, mas variavam entre 1.9 e 4.7 g/s de acordo com o dia de medição. Para determinar a concentração do traçador, as amostragens foram realizadas entre 2 e 3 m acima do nível do solo, em três arcos de formato semi-circular, com distância radial da torre de emissão de cerca de 2, 4 e 6 km. A concentração foi medida em três intervalos consecutivos de 20 min, totalizando 1 h de tempo de amostragem. [53].

A Figura 2 é um esquema demonstrativo do Experimento de Copenhagen em que o ponto central "TV-TOWER" corresponde ao ponto de emissão. Os pontos dispostos em arcos representam os amostradores e sua distribuição semi-circular. Foram realizadas medidas de: velocidade do vento a 10, 60, 120 e 200m acima do nível do solo, em intervalos de 10 minutos; direção do vento a 10, 120, 200m acima do nível do solo, também em intervalos de 10 minutos; temperatura a 2, 40, 80, 120, 160, 200m acima do nível do solo durante 10 segundos, a cada 10 minutos. No ponto de lançamento (115m) 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 [53; 54]. Os dados experimentais recolhidos no experimento de Copenhagen serão utilizados neste trabalho como parâmetro de avaliação da boa performance dos modelos propostos.

As condições meteorológicas da dispersão de Copenhagen são mostradas na Tabela 1, onde

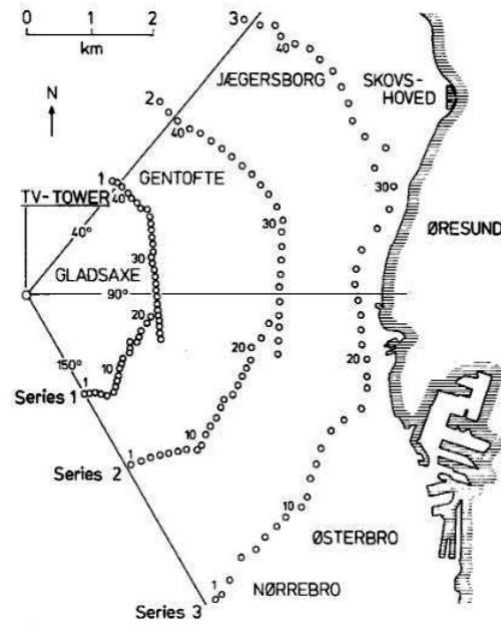


Figura 2: Esquema demonstrativo do Experimento de Copenhagen. Gryring (1981)

\bar{u}_{10} é a velocidade do vento médio á 10m, u_* é a velocidade de fricção e L é o comprimento de Monin-Obukhov

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

Tabela 1: Condições metereológicas durante o experimento de Copenhagen, 1978.

Geralmente, a performance dos modelos de dispersão, é validada por um conhecido grupo de índices descritos por Hanna [7] e definidos a seguir:

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

informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos e observadas. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o mais próximo de zero possível para um bom modelo.

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

descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Valores positivos indicam que os dados estão correlacionados e valores negativos, que os dados estão inversamente relacionados. Para um boa performance o seu valor deve ser 1.

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

informa a tendência do modelo de superestimar (quando $FB < 0$) ou subestimar (quando $FB > 0$) as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

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

o valor ótimo é zero

onde c_o e c_p são as concentrações observadas e previstas pelo modelo, respectivamente, e σ_o é o desvio padrão observado e σ_p é o desvio padrão previsto pelo modelo.

$$\text{FA2 (fator de dois)} = 0,5 \leq \frac{c_p}{c_o} \leq 2$$

que refere-se à hipótese do valor previsto estar entre a metade e o dobro do observado. O valor ideal dessa razão é 1, e quanto maior for o percentual de dados dentro do $FA2$, maior é a confiabilidade do modelo. Os dados foram implementados na linguagem de programação Wolfram que tem ênfase em computação simbólica, programação a partir de funções matemáticas e programação lógica, garantindo a eficaz resolução das equações diferenciais que regem os modelos fracionários propostos.

Os índices estatísticos utilizados para validar a performance deste modelo são mostrado na Tabela 3.

A Tabela 2 mostra os resultados estimados para a concentração lateralmente integrada de contaminante, obtidos no experimento de Copenhagen [55], em comparação com os dados experimentais, com o Modelo Gaussiano (50), e com resultados obtidos a partir do Modelo SM [2] (onde é proposto um modelo dado pela (29) com $\alpha = 1$). Nos Modelos Gaussiano e α -Gaussiano, a velocidade do vento médio na direção longitudinal (u) é obtida pela Tabela 1 e a constante K do coeficiente de difusão, a fim de comparar, como sendo a média do coeficiente de difusão dado pela equação (28) (com $\alpha = 1$) na maior distância x de cada experimento.

Os modelos fracionários propostos obtiveram boa performance, como é mostrado nas Ta-

Exp.	Distância (m)	Observado	α -Gaussiano	Gaussiano	α -SM	SM
1	1900	6.48	6.32	3.61	7.74	4.62
1	3700	2.31	4.97	2.72	4.20	2.30
2	2100	5.38	4.14	2.47	4.89	3.18
2	4200	2.95	3.27	1.76	2.79	1.58
3	1900	8.20	6.51	4.00	8.91	5.66
3	3700	6.22	5.22	3.73	5.03	2.88
3	5400	4.30	4.66	3.72	3.95	2.21
4	4000	11.7	10.60	10.25	8.21	5.93
5	2100	6.72	5.71	3.98	7.55	4.81
5	4200	5.84	4.70	3.93	4.28	2.43
5	6100	4.97	4.36	3.93	3.27	2.00
6	2000	3.96	2.90	1.72	3.90	2.63
6	4200	2.22	2.27	1.24	2.23	1.28
6	5900	1.83	2.08	1.12	1.79	0.90
7	2000	6.70	4.68	2.77	6.21	4.16
7	4100	3.25	3.65	1.95	3.50	2.03
7	5300	2.23	3.34	1.73	2.79	1.56
8	1900	4.16	5.75	3.51	7.32	4.87
8	3600	2.02	4.72	3.01	4.68	2.74
8	5300	1.52	4.18	2.95	3.39	1.84
9	2100	4.58	3.77	2.26	5.26	3.44
9	4200	3.11	2.99	1.61	3.07	1.74
9	6000	2.59	2.63	1.35	2.24	1.19

Tabela 2: Concentrações observadas e estimadas de vento lateralmente integrado $\overline{c_y} (10^{-4} sm^{-2})$ para o experimento de Copenhagen.

Modelo	Cor	NMSE	FS	FB	FA2
α -Gaussiano	0.83	0.07	0.30	0.001	0.87
Gaussiano	0.82	0.23	0.27	-0.39	0.73
α -SM	0.83	0.08	0.17	0.03	0.83
SM	0.80	0.30	0.50	-0.44	0.74

Tabela 3: Índices estatísticos utilizados para a validação dos modelos propostos (Eq. 71)

belas 2 e 3. A Tabela 3 mostra os índices estatísticos obtidos pelos modelos matemáticos fracionários e os resultados obtidos no experimento de dispersão de Copenhagen [55]. A partir da análise dos resultados para os índices estatísticos, podemos perceber que o Modelo α -Gaussiano tem um desempenho muito melhor do que o Modelo Gaussiano ao descrever os dados do experimento de Copenhagen. O Modelo α -Gaussiano se mostra mais eficiente em virtude da presença da difusão anômala em difusões turbulentas. É importante observar que o Modelo α -Gaussiano também tem uma melhor performance que o Modelo SM [2], onde foi considerado que o coeficiente de difusão é uma função $K_z = K(x) = \rho x$, a fim de lidar com a difusão anômala do problema.

Além disso na Tabela 3 nós vemos que o modelo α -SM tem uma performance extra muito pequena em comparação ao α -Gaussiano. Este resultado indica que talvez não tenha muita vantagem considerar o coeficiente de difusão como uma função não significativa fisicamente. Finalmente, a fim de estimar o melhor valor α para cada modelo, foram analisadas as soluções para $\alpha = 0.7$ à $\alpha = 0.99$ em passos de 0.1. Os resultados obtidos pelo α -SM e mostrados na Tabela 3 são para $\alpha = 0.92$. Para este valor de alpha o Modelo SM (71) tem os melhores índices estatísticos. Para o Modelo α -Gaussiano (49) a melhor performance se dá quando $\alpha = 0.80$. Essa diferença no melhor valor α está relacionada com os diferentes coeficientes de difusão utilizados em ambos os casos. No Modelo Gaussiano (50), o coeficiente de difusão (K) é constante, porém, no Modelo α -SM o coeficiente de difusão é uma função para a distância x (71). Isso sugere uma relação direta entre a ordem da equação (inteira ou fracionária) e a qualidade do coeficiente de difusão para definir qual o melhor modelo para descrever os dados de concentração observados.

Os modelos tradicionais ($\alpha = 1$) tem origem através da equação de difusão molecular (Lei de Fick), a qual assume uma distribuição gaussiana. Assimetrias relacionadas com o fluxo turbulento na atmosfera são descritas pelo coeficiente de difusão. Já o modelo fracionário proposto por este trabalho, assume a distribuição probabilística de Levy, que foi provada mais eficiente para descrever o movimento de partículas em um fluxo turbulento [45].

6 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

O principal objetivo do trabalho foi investigar o potencial de aplicação de derivadas fracionárias para modelar a difusão de poluentes na atmosfera. O uso do cálculo fracionário na modelagem da difusão de poluentes é justificado pela presença da difusão anômala devido a turbulência.

Nas últimas décadas o uso de operadores diferenciais fracionários emergiu como uma valiosa ferramenta matemática para modelar a difusão anômala [45]. Entretanto, o uso de derivadas fracionárias na modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera é muito pouco explorada. Nesse contexto, a fim de investigar o potencial de aplicação de derivadas fracionárias para modelar a dispersão de poluentes, nós propomos dois modelos simples de equações diferenciais fracionárias para a distribuição espacial da concentração de um poluente não reativo na CLC. Resolvemos estes modelos fracionários e comparamos as soluções com modelos tradicionais de derivadas de ordem inteira e com um experimento real.

Pudemos observar que o Modelo α -Gaussiano (49) tem uma melhor performance que o Modelo Gaussiano de derivadas de ordem inteira e ainda melhor do que o modelo proposto por Sharan [2], onde foi considerado o coeficiente de difusão como uma função da posição para lidar com a difusão anômala. Destacamos que a comparação entre o Modelo α -Gaussiano (49) e o Modelo α -SM (68) de derivadas fracionárias, indica que ao usar o cálculo fracionário pode-se ter pouca vantagem ao considerar o coeficiente de difusão como uma função da posição, visto que o Modelo α -Gaussiano com coeficiente de difusão constante nos dá uma ótima performance.

O estudo do cálculo fracionário é bastante recente mas as pesquisas estão crescendo gradativamente nas mais diversas áreas como mecânica dos fluidos, fenômenos de transporte, redes elétricas, probabilidade, biomatemática, entre tantas outras. Neste trabalho, a modelagem da dispersão de um contaminante na Camada Limite Convectiva através de equações diferenciais parciais de ordem fracionária mostrou-se bastante conveniente no que diz respeito à precisão dos resultados.

Estes resultados motivam cada vez mais investigações de aplicação das equações diferenciais fracionárias para modelar a equação de difusão poluentes na CLC. É importante observar que no presente trabalho escolhemos substituir apenas a derivada de primeira ordem em x por uma de ordem fracionária α na equação de difusão-advectação.

Uma alternativa para trabalhos futuros seria a possibilidade de considerar um modelo geral onde todas as derivadas em x , y e z sejam substituídas por derivadas de ordem fracionárias de ordem α , β e γ , respectivamente. Além disso, seria possível propor um modelo onde a derivada de ordem fracionária esteja diretamente relacionada com a parametrização do fluxo de concentração no termo difusivo da equação (27), admitindo assim novas abordagens para o cálculo fracionário a partir do modelo Gaussiano.

REFERÊNCIAS

- [1] G.K. Batchelor. *The Theory Homogeneous Turbulence*, Cambridge University Press (1953), 197.
- [2] M. Sharan and M. Modani, *A two-dimensional analytical model for the dispersion of air-pollutants in the atmosphere with a capping inversion*, Atmospheric Environment **40** (2006), 3479–3489.
- [3] S. Wortmann, M.T. Vilhena, D.M. Moreira, D. Buske, *A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL*, Atmospheric Environment **39** (2005) 2171?-2178
- [4] D. M. Moreira, M. T. Vilhena, D. Buske, T. Tirabassi, *The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere*, Atmospheric Research **92** (2009) 1-17.
- [5] F. A. U. Sastre, C. R. J. Campos, G. A. Degrazia e D. M. Moreira, *Simulação da dispersão de contaminantes em condições de forte convecção*, Revista Brasileira de Meteorologia, v. 20, n. 2, (2005) 165-174.
- [6] D. M. Moreira, A. C. Moraes, A. G. Goulart, A. Almeida, T. Toledo, *A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance*. Atmospheric Environment, v. 83, (2014) 254-259.
- [7] S. R. Hanna, *Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods*, Atmospheric Environment **23** (1989), 1385–1395.
- [8] A. A. Marrouf, A. S. Mohamed, I. Galal, K. S. M. Essa, *An analytical solution of two dimensional atmospheric diffusion equation in a finite boundary layer* International Journal of Advanced Research, v. 1, (2013), 356-365.

- [9] C. H. Huang, *A theory of dispersion in turbulent shear flow* Atmospheric Environment, V. 13, Issue 4, (1979), 453, 463.
- [10] G. A. Degrazia, D. Anfossi, J. C. Carvalho, C. Mangia, and T. Tirabassi, *Turbulence parameterization for pbl dispersion models in all stability conditions*, Atmos. Environment 34 (2000), 3575–3583.
- [11] L. S. Pereira, *Assimilação de dados na estimativa de concentração de poluentes atmosféricos* Dissertação de Mestrado (PPGMMat), Pelotas, (2016), 44 f.
- [12] C. S. Venzke, *Simulação da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente na CLC* Cristiane Schwartz Venzke, Dissertação de Mestrado, Pelotas, (2015), 72 f.
- [13] K. Rui, *Influência da velocidade de deposição no solo na modelagem multidimensional da dispersão de poluentes atmosféricos* Karine Rui, Pelotas, (2016), 96 f.
- [14] J. C. Carbalho, M. T. M. B. Vilhena, *Pollutant dispersion simulation for low wind speed condition by the ILS method* Atmospheric Environment **39** (2005) 6282–6288.
- [15] F. N. Frenkiel, *Turbulent Diffusion: mean concentration distribution in a flow field of homogeneous turbulence* Advances in Applied Mechanics, v. 3, (1953) p. 61 - 107.
- [16] E. S. Oxley, *Modelagem de bioconversão de glicerol em 1,3-propanodiol através de derivadas fracionárias* Estefani de Souza Oxley. (2016), 76 f.
- [17] E.K. Lenzi, L.R. da Silva, A.T. Silva, L.R. Evangelista, M.K. Lenzi, *Some results for a fractional diffusion equation with radial symmetry in a confined region*, Physica A, 388, (2009), 806.
- [18] A. T. Silva, *Problemas de contorno envolvendo as equações de difusão normal, fracionária e fracionária não-linear* Aluizio Torres da Silva. Tese de Doutorado, Maringá, (2009), 110.
- [19] R. A. Pfaffenzeller, *Modelagem de processos usando equações diferenciais parciais fracionárias* Dissertação de Mestrado, Curitiba, (2010), 71 f.

- [20] J. A. Businger. *Equations and Concepts*, In: F.T.M. NIEUWSTADT and H. VON DOP (Ed.) *Atmospheric turbulence and Air Pollution Modeling*. D. Reidel Publishing Company, (1981), 1 - 36.
- [21] L. D. Landau; E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*, London: Pergamon Press. (1959), 536.
- [22] B. R. Stull. *An introduction to boundary layer meteorology* Atmospheric Science Library. Roland B. Stull, (1988), 340.
- [23] T. Yamada. *PBL Similarity Profiles Determined from a Level-2 Turbulence-Closure Model*, Boundary Layer Meteorology. Dordrecht and Boston. V. 17, (1979), 333-351.
- [24] V. S. Bachtiar; F. Davies; F. M. Danson. *A combined model for improving estimation of atmospheric boundary layer height* Atmospheric Environment. V. 98, (2014), 461–473.
- [25] P. J. Richards; S. E. Norris. *Appropriate boundary conditions for a pressure driven boundary layer*, Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. V. 142, (2015), 43–52.
- [26] P. Seibert; F. Beyrich; S. Gryning; S. Joffre; A. Rasmussen; P. Tercier. *Review and intercomparison of operational methods for the determination of the mixing height*, Atmospheric Environment, V. 34, (2000), 1001–1027.
- [27] D. S. Vieira. *Equações de Difusão e o Cálculo Fracionário*. Denner Serafim Vieira. Il. Graf. Maringá (2015), 186.
- [28] R. F. Camargo. *Cálculo Fracionário e Aplicações*. Tese de Doutorado, UNICAMP, (2009).
- [29] L. Debnath, *Recent applications of fractional calculus to Science and Engineering*, Int. J. Math. (2003), 3413-3442.
- [30] W. R. Schneider; W. Wyss. *Fractional diffusion and wave equations*, J. Math. Phys.(1989), 134?-144.
- [31] O. P. Agrawal. *Fractional variational calculus and the transversality conditions*, J. Phys. A: Math, (2006).
- [32] G. Zaslavsky. *Chaos, Fractional kinetics and Anomalous Transport* Physics Reports, (2002), 371:461-580.

- [33] B. D. Amaral, *Solução da Equação de Transporte Multidimensional em Geometria Cartesiana e Meio Infinito Usando Derivada Fracionária* Dissertação de Mestrado, Porto Alegre, (2003).
- [34] A. Bultheel, H. Martinez-Sulbaran, *Recent Developments in the Theory of the Fractional Fourier and Linear Canonical Transforms* Bulletin of the Belgian Mathematical Society - Simon Stevin, **13** n° 5, (2007) 971 – 1005.
- [35] I. Podlubny. *Fractional Differential Equations*, Mathematics in Science and Engineering, Academic Press, San Diego V. 198, (1999).
- [36] R. Hilfer. *Applications of Fractional Calculus in Physics*, World Scientific, Singapore. V. 1. (2000).
- [37] W. Deng. *Short memory principle and a predictor-corrector approach for fractional differential equations*. Journal of Computational and Applied Mathematics. (2007), 174 - 188).
- [38] M. J. Lazo, *Introdução ao Cálculo Fracionário*, Matheus Jatkoske Lazo, Rio Grande, (2012), 32.
- [39] S. G. Samko, A. A. Kilbas, O. I. Marichev, *Fractional Integrals and Derivatives - Theory and Applications*, Gordon and Breach, Linghorne, PA, (1993).
- [40] A. A. Kilbas, H. M. Srivastava and J. J. Trujillo, *Theory and Applications of Fractional Differential Equations*, Elsevier, Amsterdam (2006).
- [41] K. S. Miller and B. Ross, *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations*, Wiley, New York, (1993).
- [42] K. Diethelm, *The Analysis of Fractional Differential Equations: An Application-Oriented Exposition Using Differential Operators of Caputo Type*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2010).
- [43] K. B. Oldham and J. Spanier, *The Fractional Calculus*, Academic Press, New York (1974).
- [44] S. P. Arya. *Modelling and Parametrization of Near-Source Diffusion in Weak Winds*. J. Appl. Meteor. V. 34, (1995), 1112-1122.
- [45] R. Metzler and J. Klafter, *The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach*, Physics Reports **339** (2000), 1 – 77.

- [46] G. T. Csanady, *Turbulent Diffusion in the Environment*, Springer Netherland (1973).
- [47] D. M. Moreira, M. T. Vilhena, T. Tirabassi, D. Buske, R. Cotta. *Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method*, Atmospheric Environment, **39** (2005), 6289–6294.
- [48] H. A. Panofsky and J. A. Dutton, *Atmospheric Turbulence*, John Wiley & Sons, New York (1984).
- [49] J. S. Irwin, *A theoretical validation of the wind profile power law exponent as a function of surface roughness and stability*, Atmospheric Environment, **13**, (1979), 191–194.
- [50] F.B. Smith, *The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere*, J. Fluid Mech. **2** (1957), 49–76.
- [51] G. I. Taylor, *Diffusion by continuous movements*, Proc. London Math. Soc. **20** (1921), 196–212.
- [52] E. C. Oliveira e J. E. Maiorino, *Introdução aos Métodos de Matemática Aplicada*, Editora da Unicamp, Campinas (2003).
- [53] S. E. Gryning, *Elevated source SF6-tracer dispersion experiments in the Copenhagen area*, Risø National Laboratory, Roskilde (1981), p. Relatório.
- [54] S. E. Gryning and E. Lyck, *Atmospheric dispersion from elevated sources in a urban area: comparison between tracer experiments and model calculations*, Journal of Applied Meteorology, **23**, (1984), 651–660.
- [55] G.A. Briggs, *Diffusion estimation for small emissions*, ATDL Contribution File No. 79, in *Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory* (1973).