



CENTRO UNIVERSITÁRIO SENAI CIMATEC

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM

COMPUTACIONAL E TECNOLOGIA INDUSTRIAL

Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

Tese de Doutorado

**NOVA DIREÇÃO EM PROBLEMAS DE DISPERSÃO
DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS USANDO
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS FRACIONÁRIAS**

Apresentada por: Paulo Henrique Farias Xavier
Orientador: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira

Fevereiro de 2021

Paulo Henrique Farias Xavier

**NOVA DIREÇÃO EM PROBLEMAS DE DISPERSÃO
DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS USANDO
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS FRACIONÁRIAS**

Tese de Doutorado apresentado ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial, Curso de Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial do Centro Universitário SENAI CIMATEC, como requisito parcial para a obtenção do título de **Doutor em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial**.

Área de conhecimento: Sistemas Complexos

Orientador: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira

Centro Universitário SENAI CIMATEC

Salvador

Centro Universitário SENAI CIMATEC

2021

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do Centro Universitário SENAI CIMATEC

X3n Xavier, Paulo Henrique Farias

Nova direção em problemas de dispersão de poluentes atmosféricos usando equações diferenciais fracionárias / Paulo Henrique Farias Xavier. – Salvador, 2021.

79 f.: il. color.

Orientador: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira

Tese (Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial) – Programa de Pós-Graduação, Centro Universitário SENAI CIMATEC, Salvador, 2021.

Inclui referências.

1. Modelos matemáticos. 2. Equação por Laplace. 3. Método de decomposição. 4. Camada limite planetária. 5. Dispersão de poluente. I. Centro Universitário SENAI CIMATEC. II. Moreira, Davidson Martins. III. Título.

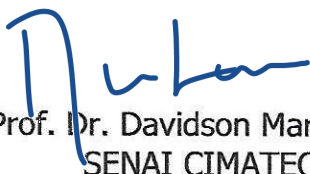
CDD 511.8

Centro Universitário SENAI CIMATEC

Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

A Banca Examinadora, constituída pelos professores abaixo listados, leu e aprovou a Tese de doutorado, intitulada "Uma Nova Abordagem em Problemas de Dispersão de Poluentes Atmosféricos Usando Equações Diferenciais Fracionárias", apresentada no dia 26 de fevereiro de 2021, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Doutor em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial.

Orientador:



Prof. Dr. Davidson Martins Moreira
SENAI CIMATEC

Membro Interno:



Prof. Dr. Erick Giovani Sperandio Nascimento
SENAI CIMATEC

Assinado digitalmente por Erick Giovani
Sperandio Nascimento
DN: C=BR, S=Bahia, L=Salvador,
O=SENAI/DR/BA, CN=Erick Giovani Sperandio
Nascimento, E=erick.sperandio@fielb.org.br
Razão: Eu sou o autor deste documento
Localização: sua localização de assinatura aqui
Data: 2021.03.03 15:01:11-03'00'
Foxit Reader Versão: 10.1.0

Membro Interno:



Prof. Dr. Roberto Luiz Souza Monteiro
SENAI CIMATEC

Membro Externo:



Prof.ª Dr.ª Vania Gonçalves de Brito dos Santos
UNEB

Membro Externo:



Prof. Dr. Marcelo Romero de Moraes
UNIPAMPA

Agradecimentos

A Nosso Senhor Jesus Cristo por ter me dado saúde e força para superar as dificuldades. Ao Prof. Dr. Davidson Martins Moreira pelo grande suporte, orientação, apoio, incentivo e pela dedicação durante todo o desenvolvimento deste trabalho. Especialmente pelos conselhos oferecidos e pela amizade para comigo.

Ao Centro Universitário SENAI CIMATEC, seu corpo docente, direção e administração pela oportunidade e suporte financeiro.

A Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia (FAPESB) pelo suporte financeiro.

Ao Prof. Dr. Renelson Ribeiro Sampaio pelos conselhos .

Ao Prof. Dr. Hernane Borges de Barros Pereira pelo grande incentivo.

A minha esposa Marley Reis de Oliveira pelo amor, apoio e paciência!

A minha mãe, Anália Farias Xavier (*in memoriam*), pela vida, educação e valores éticos.

Ao meu irmão Luiz Paulo Farias Xavier, que apesar da distância e do destino nos ter separados tão cedo sempre esteve vivo em minha memória e no coração. Um ser humano de grande personalidade! Um irmão/amigo que sempre me incentivou.

Aos colegas presentes nesta jornada de aprendizado em especial: Anderson Palmeira, Andréa Brito, Florêncio Mendes Filho, Gilney Tosta, José Roberto Dantas da Silva, José Vicente Cardoso Santos, Julie Miranda e William Souza.

Aos amigos Adriano Pena Junior, Mailton Barbosa, Mário Félix, Neiwson Hohenfeld, e Ricardo Serravalle, pessoas de grande personalidade e consideração! Amigos que me acompanham desde a graduação (1995), apoiando, incentivando e vibrando com cada vitória.

Salvador, Brasil
26 de Fevereiro de 2021

Paulo Henrique Farias Xavier

Resumo

Os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes atmosféricos são numerosos e, de uma complexidade tal, que não é possível descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos, que resultam ser um instrumento técnico indispensável para a gestão ambiental. O maior problema está ligado à compreensão da descrição com um grande detalhamento espaço-temporal de um fenômeno complexo como é o caso da turbulência atmosférica. Assim, a modelagem matemática surge como uma direção científica que usa amplamente a matemática e a computação científica orientada ao aproveitamento de métodos matemáticos avançados, os quais podem ser utilizados na solução de problemas de engenharia e multifísica. Neste contexto, em ambientes atmosféricos, as equações diferenciais tradicionais (derivadas de ordem inteira) não descrevem adequadamente o problema da difusão turbulenta, pois as derivadas usuais não estão bem definidas no comportamento não diferenciável introduzido pela turbulência, onde o cálculo fracionário tem se tornado uma ferramenta muito útil para estudar a dispersão anômala e outros processos de transporte. Desta forma, considerando-se esta nova tendência da utilização do cálculo fracionário em várias áreas do conhecimento, este trabalho busca apresentar novas soluções analíticas da equação de difusão-advecção bidimensional e tridimensional, de ordem fracionária, no sentido de Caputo e também com derivada conformável, aplicadas à dispersão de poluentes atmosféricos. No problema bidimensional, a solução é obtida aplicando-se o Método da Decomposição por Laplace (LDM), considerando-se a turbulência vertical dependente da distância longitudinal da fonte com expoente fracionário da mesma ordem da derivada fracionária. Para o problema tridimensional, a solução é obtida aplicando-se a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT), resolvendo-se o problema transformado pelo método LDM, considerando-se a difusão turbulenta lateral e vertical dependentes da distância longitudinal da fonte, resultando com esta combinação uma nova metodologia. Para ambos os problemas, por simplicidade, o parâmetro fracionário é levado em conta somente no termo advectivo. As soluções fracionárias são mais gerais que as soluções tradicionais, no sentido de que a consideração da ordem inteira no parâmetro fracionário produz a solução tradicional. No aspecto matemático, cabe salientar que as soluções são simples, fáceis de implementar computacionalmente e convergem rapidamente. Fisicamente, as soluções consideram o efeito de memória no coeficiente de difusão e na derivada fracionária. Para avaliação da performance dos modelos foram realizadas simulações numéricas das soluções fracionárias propostas com as soluções tradicionais usando dados experimentais de concentração medidos ao nível do solo. Os melhores resultados foram obtidos com os modelos que consideram derivadas de ordem fracionária.

Palavras-chave: Método de decomposição por Laplace. Equação de difusão-advecção. Camada limite planetária. Dispersão de poluentes. Modelagem matemática.

Abstract

The processes governing the transport and diffusion of air pollutants are numerous and so complex that they cannot be described without the use of mathematical models, which result in a crucial technical tool for environmental management. The biggest problem is linked to the understanding of the description with a great deal of space-time detail of a complex phenomenon, such as atmospheric turbulence. Thus, mathematical modeling emerges as a scientific direction that makes extensive use of mathematics and scientific computation oriented to the use of advanced mathematical methods, which can be used to solve engineering and multiphysical problems. In this context, in atmospheric environments, the traditional differential equations (whole order derivatives) do not adequately describe the problem of turbulent diffusion, because the usual derivatives are not well defined in the non-differentiated behavior introduced by turbulence, where fractional calculus has become a very useful tool to study anomalous dispersion and other transport processes. Therefore, considering this new trend in the use of fractional calculation in several areas of knowledge, this work seeks to present new analytical solutions of the two-dimensional and three-dimensional diffusion-advection equation, of fractional order, in the direction of Caputo and with conformable derivative, applied to the dispersion of atmospheric pollutants. In the two-dimensional problem, the solution is obtained by applying the Laplace Decomposition Method (LDM), considering the vertical turbulence dependent on the longitudinal distance of the source with a fractional exponent of the same order as the fractional derivative. For the three-dimensional problem, the solution is obtained by applying the Generalized Integral Transform Technique (GITT), solving the transformed problem by the LDM method, considering the lateral and vertical turbulent diffusion dependent on the longitudinal distance of the source, resulting with this combination a new methodology. For both problems, for simplicity, the fractional parameter is taken into account only in the advective term. Fractional solutions are more general than traditional solutions, in the sense that considering the whole order in the fractional parameter produces the traditional solution. From a mathematical point of view, it should be noted that the solutions are simple, easy to implement computationally and converge quickly. Physically, the solutions consider the memory effect on the diffusion coefficient and the fractional derivative. To evaluate the performance of the models, numerical simulations of the proposed fractional solutions were performed using experimental concentration data measured at ground level. The best results were obtained with the models that consider derivatives of fractional order.

Keywords: Laplace decomposition method. Advection-diffusion equation. Planetary boundary layer. Pollutant dispersion. Mathematical modeling.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Definição do problema	4
1.2	Objetivos	4
1.2.1	Geral	4
1.2.2	Objetivos específicos	4
1.3	Hipótese	4
1.4	Aspectos Metodológicos	5
1.5	Organização da Tese	5
2	Estado da Arte	7
3	Metodologia	10
3.1	Preliminares	10
3.1.1	Notação usual	10
3.1.2	Derivada Fracionária: definição de Caputo	11
3.1.3	A Transformada de Laplace via Caputo	12
3.1.4	A Função de Mittag-Leffler	12
3.1.5	Derivada Fracionária Conformável	13
3.2	Método de Decomposição por Laplace	13
3.3	GITT	16
3.4	Soluções da Equação de Difusão-Advecção	16
3.4.1	Solução Bidimensional via Caputo	18
3.4.2	Solução Tridimensional via Caputo	22
3.4.3	Solução Bidimensional via Derivada Conformável	30
3.4.4	Solução Tridimensional via Derivada Conformável	32
4	Resultados Numéricos	34
4.1	Dados Experimentais	34
4.2	Simulações Bidimensionais	34
4.2.1	Derivada Fracionária de Caputo	36
4.2.2	Derivada Conformável	43
4.3	Simulações Tridimensionais	48
4.3.1	Derivada Fracionária de Caputo	49
4.3.2	Derivada Conformável	55
5	Considerações Finais	61
	Referências	62

Lista de Tabelas

4.1	Parâmetros meteorológicos durante o experimento de Copenhagen.	35
4.2	Indicadores estatísticos de desempenho do modelo para diferentes valores de α com velocidade do vento U_{115}	38
4.3	Indicadores estatísticos de desempenho dos modelos para diferentes valores de α com velocidade do vento U_{10}	39
4.4	Indicadores estatísticos de desempenho do modelo para diferentes valores de α com velocidade do vento U_{115}	45
4.5	Parâmetros meteorológicos durante o experimento de Copenhagen.	49
4.6	Avaliação estatística dos modelos.	51
4.7	Avaliação estatística dos modelos com derivada conformável.	56

Lista de Figuras

4.1	Convergência da série no modelo usando o experimento 1 de Copenhagen, com velocidade do vento U_{115}	36
4.2	Concentração integrada lateralmente ao nível do solo em função da distância da fonte, considerando diferentes parâmetros fracionários	37
4.3	A razão entre C_p e C_0 em função de C_0	40
4.4	Gráfico residual (C_p/C_o) da concentração em função da distância da fonte	41
4.5	A razão entre C_p e C_0 em função de C_0	42
4.6	Gráfico residual (C_p/C_o) da concentração em função da distância da fonte	43
4.7	Concentração integrada lateralmente ao nível do solo em função da distância da fonte, considerando diferentes parâmetros fracionários	44
4.8	Espalhamento da concentração de poluentes usando U_{115} e $\phi = 1$ m e diferentes valores de α	46
4.9	Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α	47
4.10	Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 10^{-3}$ m e diferentes valores de α	48
4.11	Teste de convergência do modelo: (a) concentração em função do número de autovalores i (GITT); (b) concentração em função do número de termos na série n (LDM)	50
4.12	Razão entre a concentração prevista (C_p) e a observada (C_o) ao nível do solo: a) velocidade do vento a 115 m; b) velocidade do vento a 10 m	53
4.13	Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte, considerando a velocidade do vento medida em 10 m (linhas vermelhas) e 115 m (linhas azuis), para diferentes parâmetros fracionários: $\alpha = 1,00$, $\alpha = 0,98$ e $\alpha = 0,96$ (experimento de Copenhagen)	54
4.14	Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α	57
4.15	Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 10^{-3}$ m e diferentes valores de α	58
4.16	Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α	59
4.17	Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 10^{-3}$ m e diferentes valores de α	60

Lista de Siglas

ADMM	Advection Diffusion Multilayer Model
α	Parâmetro da Derivada Fracionária
A_n	Polinômios de Adomian
C	Derivada de Caputo
CLP	Camada Limite Planetária
Cor	Coefficiente de correlação
C/Q	Concentração Integrada Lateralmente Normalizada pela Taxa de Emissão
$\delta(\cdot)$	Função Delta de Dirac
exp	Exponencial
(η)	Eta - Representa a Microescala de Kolmogorov
FA2	Fator de dois
FB	Fator de inclinação
FS	Desvio fracional padrão
Γ	Função Gamma
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique
GITT	Generalize Integral Transform Technique
h	Altura da CLP
H_s	Altura da Fonte
λ_n	Lambda n
L_y	Comprimento na direção y
\mathcal{L}	Transformada de Laplace
\mathcal{L}^{-1}	Transformada Inversa de Laplace
K_y	Coefficiente de Difusão na Direção Transversal
K_x	Coefficiente de Difusão na Direção Longitudinal
K_z	Coefficiente de Difusão na Direção Vertical
LDM	Método de Decomposição por Laplace
M-L	Função de Mittag-Leffler
NMSE	Erro quadrático médio normalizado
o	Quantidade Observada
p	Quantidade Prevista
Q	Taxa de Emissão
R-L	Riemann-Liouville
S	Fonte/Sumidouro
σ_v	Desvio Padrão da Velocidade Lateral
σ_w	Desvio Padrão da Velocidade Vertical
S-L	Strum-Liouville
T_α	Derivada Fracionária Conformável
u	Velocidade Média Longitudinal do Vento
U_{10}	Velocidade do Vento Médio Medido a 10 m
U_{115}	Velocidade do Vento Médio Medido a 115 m
x	Distância Longitudinal da Fonte

Introdução

A gestão e a proteção da qualidade do ar pressupõem o conhecimento do estado do ambiente. Tal conhecimento envolve um aspecto propriamente cognitivo e um interpretativo. A rede de monitoramento, juntamente com o inventário das fontes de emissão, é de fundamental importância para a construção do quadro cognitivo, mas não do interpretativo. Na realidade, o controle da qualidade do ar requer um instrumento interpretativo capaz de extrapolar no espaço e no tempo os valores medidos nas posições dos analisadores. No entanto, a melhoria da atmosfera pode ser obtida somente com planos que reduzam as emissões e, então, com instrumentos (como um modelo matemático de dispersão na atmosfera) capazes de ligar a causa (a fonte) de poluição com o efeito (a concentração do poluente). Portanto, somente com modelos matemáticos é possível fazer previsões ou simular campos de concentração em conexão com políticas de limitação da liberação de poluentes em concordância com planos de melhoria da qualidade de vida da população, conforme citam Moreira & Tirabassi (2004).

A modelagem matemática sempre atraiu a atenção de pesquisadores em todo o mundo em vários campos da ciência, segundo Saba, Quiñones-Bolaños & López (2018), Succurro & Ebenhöh (2018). Nesse contexto, a modelagem da poluição do ar está entre as áreas mais desafiadoras, pois a turbulência atmosférica desempenha um papel fundamental na dispersão de poluentes com o surgimento de difusão anômala. O comportamento não diferenciável no crescimento da largura das plumas está diretamente relacionado à estrutura fractal do campo de velocidade turbulenta, onde a escala de tamanho das flutuações geralmente é muito grande em comparação à escala média, conforme preconizam Mandelbrot & Mandelbrot (1982), Sreenivasan & Meneveau (1986). Portanto, a equação clássica de difusão-advecção não explica completamente a difusão de poluentes, uma vez que os parâmetros do sistema geralmente crescem mais rapidamente do que as soluções obtidas usando modelos clássicos, Moreira & Vilhena (2009). No entanto, os modelos Eulerianos tradicionais (que usam a equação de difusão-advecção) são os mais frequentemente utilizados para modelar a dispersão de poluentes na atmosfera, Moreira *et al.* (2005a), Moreira *et al.* (2005b), Moreira *et al.* (2005c), Guerrero *et al.* (2012).

Diferentemente da difusão comum, onde o deslocamento quadrático médio aumenta linearmente com o tempo ($\sigma^2 \propto t$), o deslocamento quadrático médio não é linear na difusão anômala ($\sigma^2 \propto t^\alpha$) (se $\alpha > 1$, o fenômeno é chamado de super-difusão e, se $\alpha < 1$, é chamado de sub-difusão), Metzler *et al.* (2014). Devido à sua natureza universal, a difusão anômala desempenha um papel fundamental na análise de muitos tipos de sistemas físicos, Berryman (1977), Shlesinger, Klafter & West (1986), Shlesinger, West

& Klafter (1987), Peng *et al.* (1993), Spohn (1993), Bychuk & O’Shaughnessy (1995), Stephenson (1995), Yu & Leitner (2003). Historicamente, a difusão anômala foi observada pela primeira vez na natureza na dispersão de poluentes. Em 1926, Richardson mediu os aumentos de largura das plumas de fumaça geradas por fontes pontuais localizadas em um campo de velocidade turbulento, Richardson (1926). Com base nas observações, Richardson especulou que a velocidade do ar turbulento, que possui uma estrutura não diferenciável, pode ser descrita aproximadamente pela função Weierstrass, Piranian (1966). Essa inferência foi motivada em parte pela observação de que a largura da pluma de fumaça cresce com t^α ($\alpha \geq 3$), diferente da difusão comum, onde $\alpha = 1$. Para lidar com a difusão anômala, é comum modificar os modelos Eulerianos assumindo que a estrutura física do escoamento turbulento e campos de velocidade são descritas por complexos coeficientes de difusão e perfis médios de velocidade que são funções das coordenadas espaciais, Wyngaard (1988). Essas funções são geralmente escolhidas para ajustar dados experimentais ou são obtidas da teoria da difusão estatística de Taylor, Taylor (1922). Como um meio alternativo de levar em conta a dispersão anômala, um importante avanço na modelagem matemática surgiu recentemente com o crescente interesse em derivadas fracionárias, Podlubny (1998), conhecido como generalização do cálculo integral e diferencial, Debnath (2007). De fato, existe uma tendência natural de usar o cálculo fracionário nas mais diversas áreas do conhecimento, incluindo métodos numéricos para resolver a equação de Navier-Stokes, Xu, Jiang & Yu (2017).

Um importante avanço na modelagem matemática surgiu recentemente com o novo interesse em derivadas fracionárias. O tópico foi mencionado pela primeira vez na conhecida troca de correspondência entre Leibniz e L’Hôpital, em 1695, sobre derivadas de ordem não inteira, Oldham & Spanier (1974). Apesar de várias contribuições subsequentes para o desenvolvimento do conceito, foi apenas na década de 1970, ou seja, quase três séculos depois, que o assunto foi debatido na primeira conferência internacional sobre cálculo fracionário e suas aplicações nas ciências, Ross (1974). Vários trabalhos discutiram os aspectos matemáticos e físicos desse importante tema, conhecido como a generalização do cálculo integral e diferencial, Debnath & Bhatta (2007). Apesar dos grandes avanços realizados em soluções numéricas de equações, ainda há um grande interesse em soluções analíticas de equações diferenciais, incluindo o uso de cálculo fracionário, especialmente equações diferenciais fracionárias, para descrever muitos fenômenos naturais, cônsono Zaslavsky (1994), Meerschaert & Tadjeran (2004), Gorenflo & Mainardi (2009), Schumer, Meerschaert & Baeumer (2009). No entanto, derivadas fracionárias foram usadas apenas recentemente em aplicações práticas, Debnath (2003), Moreira & Moret (2018), Moreira & Santos (2019). O cálculo fracionário tornou-se uma ferramenta muito útil para o estudo da dispersão anômala e outros processos de transporte, sendo dada maior atenção inicialmente às aplicações em ambientes hidrológicos e porosos, Benson, Meerschaert & Revielle (2013), Deseri & Zingales (2015). Em ambientes atmosféricos, as equações diferenciais tradicionais não descrevem adequadamente o problema da difusão turbulenta porque as

derivadas usuais não são bem definidas no comportamento não diferenciável introduzido pela turbulência. As equações clássicas não explicam completamente a dispersão anômala dos poluentes, porque os parâmetros do sistema geralmente crescem mais rapidamente do que as soluções obtidas pelos modelos clássicos, dando origem ao efeito memória, que geralmente é considerado apenas em relação ao coeficiente de difusão dependente da distância da fonte.

Em problemas atmosféricos, o transporte de um poluente sob os efeitos combinados de advecção e difusão é descrito pela equação de difusão-advecção. Muitos processos físicos podem ser modelados com essa equação usando a conhecida teoria de Fick, Athayde (2019). Um exemplo é a poluição atmosférica decorrente de causas naturais ou antropogênicas, que foi sistematicamente modelada com equações diferenciais de ordem inteira tradicionais usando soluções analíticas, Moreira *et al.* (2005a), Moreira *et al.* (2005b), Moreira *et al.* (2005c), Moreira & Vilhena (2009), Moreira *et al.* (2014), Sharan & Modani (2006), Essa, Etman & Embaby (2007), Guerrero *et al.* (2012), Pimentel *et al.* (2014). No entanto, recentemente foram propostas soluções analíticas para a equação de difusão-advecção bidimensional fracionária, Goulart *et al.* (2017), Moreira & Moret (2018), Acioli, Xavier & Moreira (2019), Moreira & Santos (2019). Tendo em vista que os erros nos modelos matemáticos podem surgir da modelagem de fenômenos físicos e de erros numéricos, as soluções analíticas permitem eliminar erros numéricos nas soluções de equações, exceto os erros de arredondamento. Portanto, torna-se possível realizar análises mais realistas dos erros que surgem da modelagem matemática dos fenômenos físicos. Os modelos matemáticos propostos neste trabalho não resolvem a equação de difusão-advecção como é tradicionalmente expressa, mas modifica a estrutura matemática dessa equação para representar mais realisticamente a evolução espacial da concentração de poluentes dispersos na atmosfera. Portanto, são introduzidos operadores fracionários na equação que governa a dispersão de poluentes na camada limite planetária (CLP).

Basicamente, neste trabalho apresentam-se soluções analíticas para a equação de difusão-advecção, bidimensional e tridimensional fracionária, para simular a dispersão de poluentes na atmosfera. A novidade mais importante reside na combinação do método da decomposição por Laplace (LDM), Adomian (1994), Jafari & Daftardar-Gejji (2006) e da técnica de transformada integral generalizada (GITT), Cotta (1993), Costa *et al.* (2006), juntamente com a consideração do efeito de memória no coeficiente de difusão e na derivada fracionária. Ao se combinar os métodos LDM e GITT, obtém-se uma nova técnica para obtenção de soluções analíticas para problemas lineares e não lineares.

1.1 Definição do problema

A busca de soluções analíticas para os problemas de dispersão é um dos principais objetivos das pesquisas na área de modelagem matemática da dispersão de poluentes na atmosfera. No entanto, as soluções analíticas encontradas na literatura são basicamente para problemas lineares e equações diferenciais de ordem inteira. A metodologia empregada nesta pesquisa pode ser utilizada para resolver equações diferenciais não lineares e de ordem fracionária, sendo, portanto, um método mais geral.

1.2 Objetivos

1.2.1 Geral

Obter novas soluções analíticas da equação de difusão-advecção fracionária, bidimensional e tridimensional, com coeficientes de difusão dependentes da distância longitudinal da fonte, utilizando-se os métodos LDM, GITT e a derivada conformável.

1.2.2 Objetivos específicos

- a) Propor novos modelos matemáticos através da modificação da equação de difusão-advecção usual com a introdução de derivadas fracionárias;
- b) Obter soluções da equação de difusão-advecção fracionária, bidimensional e tridimensional, estacionária, usando a derivada fracionária de acordo com Caputo;
- c) Obter soluções da equação de difusão-advecção fracionária, bidimensional e tridimensional, estacionária, usando o conceito de derivada conformável;
- d) Comparar os resultados das soluções dos modelos propostos em problemas atmosféricos com dados experimentais na literatura.

1.3 Hipótese

As equações diferenciais fracionárias representam melhor o processo de dispersão turbulenta em problemas atmosféricos.

1.4 Aspectos Metodológicos

A equação de difusão-advecção de ordem inteira é amplamente utilizada para modelar a dispersão de poluentes atmosféricos, mas a de ordem não-inteira é considerada a generalização da equação tradicional. Para obter-se a solução analítica de uma equação diferencial fracionária, em princípio, existem duas alternativas básicas:

- a) usar uma definição de derivada fracionária, onde se pode destacar as mais populares que são Riemann-Liouville (R-L) e Caputo, cada qual com suas vantagens e desvantagens, Garrappa, Kaslik & Popolizio (2019), e aplicar uma transformada integral (Laplace ou Fourier, por exemplo), ou
- b) usar a definição de derivada conformável, Khalil *et al.* (2014), a qual transforma a derivada fracionária em uma derivada de ordem inteira, e aplicar uma transformada integral usual. Neste trabalho optou-se por soluções em séries, as quais permitem a obtenção de soluções de equações com coeficientes variáveis.

Convém mencionar que no âmbito da elaboração deste trabalho optou-se por soluções em séries, as quais permitem a obtenção de soluções de equações com coeficientes variáveis.

De início aplicou-se o método LDM. Esse método é um algoritmo numérico, baseado na técnica de transformação por Laplace, para resolver equações diferenciais ordinárias e parciais não lineares. O método é muito adequado para problemas físicos porque não requer linearização desnecessária, perturbação ou outros métodos restritivos ou suposições que possam alterar o problema que está sendo resolvido, às vezes consideravelmente.

Em seguida aplicou-se a GITT, que na verdade é um método híbrido bem conhecido que tem sido empregado para resolver uma ampla gama de problemas diretos e inversos, nas áreas de transferência de calor e mecânica de fluidos, conforme citam Cotta (1993), Cotta & Mikhailov (1997), Cotta, Unga & Mikhailov (2003), Cheroto *et al.* (1999). As principais etapas deste método são a construção do problema auxiliar de Sturm-Liouville associado ao problema original; a determinação da técnica de transformação integral em série; bem como, a substituição dessa expansão no problema original. Este procedimento leva a um conjunto de equações diferenciais ordinárias que são resolvidas classicamente por métodos numéricos.

1.5 Organização da Tese

Este documento apresenta cinco capítulos e está estruturada da seguinte forma:

Capítulo 1 - Introdução: Fornece a motivação e os objetivos do trabalho;

Capítulo 2 - Estado da arte: Apresenta uma revisão bibliográfica do trabalho realizado na área do tema abordado;

Capítulo 3 - Metodologia: Apresenta os conceitos de derivadas fracionárias, os métodos GITT e MDL e as soluções 2D e 3D da equação de difusão-advecção;

Capítulo 4 - Resultados Numéricos: Evidencia os resultados das simulações das soluções 2D e 3D, apresentando os resultados preliminares das simulações considerando as soluções com a derivada de Caputo e Conformável;

Capítulo 5 - Considerações finais tecendo os resultados obtidos comparando-os com a proposta inicial apresentada.

Estado da Arte

A equação de difusão-advecção tem sido amplamente utilizada em modelos para determinação do campo de concentração de contaminantes na CLP. A primeira solução desta equação foi desenvolvida por Fick, no século XIX, usando o método Gaussiano. Na solução, o coeficiente de difusão e a velocidade do vento eram constantes com a altura, e as condições de contorno consideradas foram de fluxo nulo de poluentes no limite inferior e superior da CLP. Tais condições de contorno são usualmente utilizadas nas soluções analíticas da equação de difusão-advecção.

No entanto, muitos avanços e alternativas de soluções têm surgido desde então. Inicialmente, com o objetivo de resolver esta equação, é possível classificar os métodos nas seguintes categorias: numérico, semi-analítico e analítico. Existe uma vasta literatura sobre as aproximações numéricas. Para ilustração podem ser citados os trabalhos de Brebbia & Brebbia (1981), Chock, Sun & Winkler (1996), Sharan, Kansa & Gupta (1997), Zienkiewicz & Taylor (2000), Huebner *et al.* (2001), Rizza *et al.* (2003), entre outros. Considerando-se os métodos semi-analíticos podem ser mencionados os trabalhos de Parlange (1971), Dyke (1975), Henry, Wang & Gebhart (1991), Degrazia, Moreira & Vilhena (2001), Grisogono & Oerlemans (2001), Mangia *et al.* (2002), Moreira *et al.* (2005a), Moreira *et al.* (2005c), Moreira *et al.* (2005d), etc. Existe na literatura várias soluções analíticas, onde podem ser citados principalmente os seguintes trabalhos: Smith (1957), Scriven & Fisher (1975), Yeh & Huang (1975), Beryland (1975), Demuth (1978), Ulden (1978), Huang (1979), Nieuwstadt (1980), Tirabassi, Tagliazucca & Zannetti (1986), Tirabassi (1989), Ulden (1992), Chrysikopoulos, Hildemann & Roberts (1992), Singh, Yadav *et al.* (1996), Lin & Hildemann (1996), Huang (1999), Tirabassi (2003), Sharan & Gopalakrishnan (2003) entre outros. Porém, todas estas soluções analíticas são obtidas para derivadas de ordem inteira fazendo-se fortes restrições sobre a velocidade do vento e os coeficientes de difusão que, de certa forma, são considerados constantes.

Logicamente, para situações mais complexas deve-se usar um método numérico, o qual resolve numericamente, por exemplo, por diferenças finitas ou volumes finitos, a equação de difusão-advecção. No entanto, ressalta-se aqui que a importância das soluções analíticas vem do fato de que este tipo de solução permite entender melhor o fenômeno físico, uma vez que a solução é escrita em uma forma fechada, mostrando explicitamente a dependência de todos os parâmetros físicos. Desta forma, é possível investigar a influência destes parâmetros sobre a solução e também fazer uma análise da sensibilidade da solução, inclusive testar um modelo numérico.

Evidencia-se que nas últimas duas décadas foram obtidas soluções aplicando-se a técnica semi-analítica ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*), a qual tem sido utilizada para uma grande variedade de problemas Vilhena *et al.* (1998), Degrazia, Moreira & Vilhena (2001), Mangia *et al.* (2002), Moreira *et al.* (2005a), Moreira *et al.* (2005b), Moreira *et al.* (2005c), Moreira *et al.* (2005d), Moreira, Tirabassi & Carvalho (2005e), Moreira *et al.* (2006a), Moreira & Vilhena (2009), Moreira *et al.* (2014). Neste método, o domínio (CLP) é dividido em várias subcamadas e em cada uma delas são tomados valores médios para os coeficientes de difusão e velocidade do vento. Assim, o problema de coeficiente variável é substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes (médios), acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de poluentes nas interfaces. A solução em cada subcamada é obtida pelo uso da transformada de Laplace com inversão numérica. É importante salientar que esta metodologia permitiu a solução tridimensional da equação de difusão-advecção, mas com a combinação do método ADMM mais a técnica GITT Costa *et al.* (2006).

Mais recentemente, outra solução foi obtida com sucesso utilizando-se o método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Este método é totalmente analítico, resolvendo a equação com coeficientes dependentes da variável vertical e compreende os seguintes passos: solução de um problema associado de Sturm-Liouville, expansão da concentração de poluentes em uma série em termos das autofunções, substituição desta expansão na equação de difusão-advecção e, finalmente, tomar os momentos (integração). Esse procedimento leva a um conjunto de equações diferenciais ordinárias chamadas de problema transformado. Esse problema é resolvido pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização, conforme citam Wortmann *et al.* (2005), Moreira *et al.* (2005d), Moreira *et al.* (2006b), Moreira & Vilhena (2009), Buske *et al.* (2007a), Buske *et al.* (2007b), Tirabassi *et al.* (2008). Nesta mesma linha de pesquisa, mas usando outras técnicas, podem ser citados os trabalhos de Sharan & Modani (2006), Guerrero *et al.* (2012) e Pimentel *et al.* (2014). Salienta-se ainda que, apesar do avanço, todas estas soluções analíticas são obtidas para derivadas de ordem inteira.

O primeiro trabalho a levar em consideração a ideia de derivada fracionária na equação de difusão-advecção, em problemas de dispersão de poluentes atmosféricos, foi o de Goulart *et al.* (2017). No entanto, apesar da ideia inovadora, o trabalho apresentou uma solução da equação considerando coeficientes constantes pelo método de separação de variáveis. Mais recentemente, surgiram os trabalhos de Moreira & Moret (2018), Acioli, Xavier & Moreira (2019), Moreira & Santos (2019), e Palmeira, Xavier & Moreira (2019). O trabalho de Moreira & Moret (2018) propôs um método que usa a GILTT modificada para resolver o problema transformado com uma derivada fracionária no termo advectivo. O trabalho de Acioli, Xavier & Moreira (2019) mostrou uma solução usando o método LDM e método de perturbação por homotopia Adomian (1994), He (1999), Ghorbani (2008), contudo, sendo usado somente para coeficientes constantes quando considerada

a derivada fracionária. O trabalho de Palmeira, Xavier & Moreira (2019) mostra uma nova equação de difusão-advecção fracionária que governa a formação de um poluente secundário (dióxido de enxofre em sulfato) e considera os processos de remoção do poluente da atmosfera. A equação é resolvida usando uma a técnica da transformada de Laplace, considerando uma CLP verticalmente não homogênea pelo método ADMM Moreira & Vilhena (2009).

Mais recentemente, Palmeira, Xavier & Moreira (2019) apresentou uma solução analítica da equação bidimensional fracionária com um modelo evolutivo bi-fluxo, que representa uma modificação da lei de Fick, também usando o método LDM, mas para coeficientes constantes. É importante mencionar que todos esses trabalhos têm em comum a derivada fracionária apenas no termo advectivo da equação bidimensional, considerando a derivada de Caputo.

Portanto, a presente tese permitirá estudar o processo de dispersão de poluentes na atmosfera utilizando-se uma nova abordagem na solução da equação de difusão-advecção, o que representará um avanço significativo, uma vez que estará resolvendo o problema tridimensional de dispersão de poluentes de uma forma mais abrangente e realística. Cabe ressaltar que este novo método poderá ser utilizado na solução de problemas que envolvam equações diferenciais lineares e não lineares em vários campos da ciência, em particular, com aplicação direta nas ciências ambientais.

Metodologia

3.1 Preliminares

De acordo com capítulos anteriores, os modelos de ordem fracionária são uma generalização da clássica modelagem de ordem inteira. Porém, esses modelos necessitam também de técnicas mais gerais, a fim de fornecerem soluções analíticas em forma fechada e/ou estudos qualitativos das soluções. Geralmente, essas técnicas não são suficientes para muitos casos práticos relevantes. Portanto, existe uma demanda substancial por técnicas eficientes para lidar com derivadas fracionárias e integrais e equações envolvendo esses operadores. Desta forma, o objetivo nesta parte preliminar é mostrar as equações básicas para o desenvolvimento do trabalho, sem entrar em aspectos particulares de algumas definições, muitas das quais ainda estão em andamento na literatura atual. Por exemplo, a derivada de Caputo é usada como definição de derivada fracionária pelo fato de levar em conta as condições iniciais do problema físico, algo que a derivada de Riemann-Liouville não leva em conta Garrappa, Kaslik & Popolizio (2019). De modo geral muitas das definições não obedecem às regras do cálculo diferencial e integral, já bem estabelecidas no cálculo de ordem inteira, a saber, por exemplo, derivada de uma constante deve ser zero e deve obedecer a regra da cadeia. Salienta-se de que esta discussão, ainda está sendo debatida pela comunidade científica. Desta forma, o fato de se levar em conta somente no termo advectivo a derivada fracionária na equação de difusão-advectação é, de fato, uma escolha para evitar estes problemas em aberto. Neste sentido, surgiram as derivadas conformáveis Khalil *et al.* (2014), onde alguns destes problemas são de alguma forma eliminados e a equação fracionária pode ser resolvida como se fosse de ordem inteira, ou seja, da forma tradicional.

3.1.1 Notação usual

O nome cálculo fracionário é o nome para a teoria de integrais e derivadas de ordem arbitrária, a qual unifica e generaliza as noções de diferenciação e integração de ordem inteira. Assim, é possível considerar a sequência infinita de integrais e derivadas escrita como,

$$\dots \int_a^t d\tau_2 \int_a^{\tau_2} f(\tau_1) d\tau_1, \int_a^t f(\tau_1) d\tau_1, f(t), \frac{df(t)}{dt}, \frac{d^2 f(t)}{dt^2}, \dots$$

A derivada de ordem arbitrária α (real) pode ser considerada como uma interpolação desta sequência de operadores, sendo a notação usual dada por:

$${}_a D_t^\alpha f(t) \quad (3.1)$$

O nome curto dado para derivadas de ordem arbitrária é "*derivada fracionária*". Os subscritos a e α são os dois limites relacionados à operação de diferenciação fracionária. A equação diferencial fracionária é uma equação que contém derivada fracionária; uma equação integral fracionária é uma equação integral que contém uma integral fracionária. Um sistema de ordem fracionária significa um sistema descrito por uma equação diferencial fracionária ou uma equação integral fracionária ou por um sistema de tais equações.

3.1.2 Derivada Fracionária: definição de Caputo

A derivada fracionária de Caputo foi proposta pelo italiano Michele Caputo, em 1969. Apresenta sua origem na definição da derivada fracionária de Riemann-Liouville em que, a derivada de ordem arbitrária equivale à derivada de ordem inteira de uma integral de ordem arbitrária, enquanto na formulação de Caputo a derivada de ordem arbitrária é a integral de ordem arbitrária de uma derivada de ordem inteira, ou seja, há uma inversão na ordem dos operadores Gorenflo & Mainardi (2009), Machado, Mainardi & Kiryakova (2015), Teodoro, Machado & Oliveira (2019). Para muitos autores, é mais conveniente adotar a formulação de Caputo, pois diferente da formulação de Riemann-Liouville, a derivada de uma constante é nula e pode ser interpretada como uma taxa de variação, e o outro motivo é que a derivada de Caputo depende de condições iniciais dadas nas derivadas usuais da função (que são fisicamente interpretadas), enquanto que na de Riemann-Liouville depende de condições na integral fracionária que não tem interpretação física trivial. Portanto, neste trabalho utilizou-se a definição de Caputo, sendo a mesma dada por:

$${}^C D_t^\alpha f(t) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1-n}} d\tau, n-1 < \alpha < n \\ \frac{d^n}{dt^n} f(t), \alpha = n \end{cases} \quad (3.2)$$

onde $f^{(n)}$ representa a derivada de ordem inteira n em relação à variável t , e C representa a derivada de Caputo.

3.1.3 A Transformada de Laplace via Caputo

A transformada de Laplace de uma derivada fracionária dada pela fórmula de Caputo é representada por Podlubny (1998):

$$\mathcal{L} \{ {}^C D_t^\alpha f(t) \} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} f^{(k)}(0), \quad n-1 < \alpha \leq n \quad (3.3)$$

onde s é a variável transformada. Portanto, no caso deste trabalho,

$$\mathcal{L} \{ {}^C D_x^\alpha f(x) \} = s^\alpha F(s) - s^{\alpha-1} f(0), \quad \alpha \leq 1 \quad (3.4)$$

Neste ponto, é importante mencionar que o cálculo fracionário é uma ferramenta recém-desenvolvida que tem sido usada para modelar sistemas complexos. Apesar do intrincado contexto matemático, o cálculo fracionário é uma generalização da diferenciação e integração em ordens arbitrárias não inteiras. Nesse contexto, a derivada fracionária representa uma nova ferramenta para modelar sistemas complexos. Desta forma, várias ferramentas para resolver equações fracionárias podem ser encontradas na literatura, nas quais a conhecida transformada de Laplace é frequentemente aplicada. A transformação de Laplace da derivada fracionária de Caputo é uma generalização da transformação de Laplace de derivada de ordem inteira. Essa ferramenta é muito importante porque permite a utilização de valores iniciais de derivadas clássicas de ordem inteira com interpretações físicas conhecidas Podlubny (1998).

3.1.4 A Função de Mittag-Leffler

A função de Mittag-Leffler (M-L) é a generalização da função exponencial, a qual pode ser introduzida como uma função de somente um parâmetro pela série:

$$E_\alpha(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \quad (3.5)$$

Se $\alpha = 1$, resulta a conhecida e tradicional função exponencial,

$$E_1(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{\Gamma(k+1)} = e^t \quad (3.6)$$

3.1.5 Derivada Fracionária Conformável

A derivada conformável representa uma nova e fácil definição de derivada fracionária Khalil *et al.* (2014), embora alguns autores não a definam como derivada fracionária Ortigueira & Machado (2015), Tarasov (2018). Esta nova definição mostra ser uma extensão natural da derivada usual, e satisfaz praticamente todas as propriedades do cálculo, onde todas as outras definições de derivadas fracionárias falham, pois não satisfazem a derivada do produto e do quociente de duas funções e regra da cadeia, por exemplo.

Se f é diferencial, então,

$$T_\alpha [f(t)] = t^{1-\alpha} \frac{df(t)}{dt} \quad (3.7)$$

onde T_α representa a derivada fracionária conformável.

3.2 Método de Decomposição por Laplace

O método LDM (muitas vezes chamado de *Adomian Decomposition Method*, quando usa os polinômios de Adomian) Adomian (1994), pode reduzir a quantidade de trabalho computacional necessário para resolver uma equação diferencial e melhorar a precisão dos resultados. O método LDM permite a solução de equações diferenciais parciais (EDPs) não-lineares e lineares com coeficientes variáveis. Para simplificar, a seguinte equação é tomada como exemplo; é uma equação diferencial parcial de ordem inteira (segunda ordem), não linear e não homogênea:

$$Lu(x, t) + Ru(x, t) + Nu(x, t) = h(x, t) \quad (3.8)$$

onde $L = \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ é um operador linear, N é um operador não linear, $h(x, t)$ é o termo fonte, e as condições iniciais são as seguintes:

$$u(x, 0) = f(x), \frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = g(x) \quad (3.8a)$$

No método LDM, o primeiro passo é a aplicação, em ambos os lados da (Equação (3.8)), da transformada de Laplace \mathcal{L} na variável $t(t \rightarrow s)$:

$$\mathcal{L}[Lu(x, t)] + \mathcal{L}[Ru(x, t)] + \mathcal{L}[Nu(x, t)] = \mathcal{L}[h(x, t)] \quad (3.9)$$

resultando em,

$$\mathcal{L}[u(x, t)] = \frac{f(x)}{s} + \frac{g(x)}{s^2} + \frac{1}{s^2} \mathcal{L}[h(x, t)] - \frac{1}{s^2} \mathcal{L}[Ru(x, t)] - \frac{1}{s^2} \mathcal{L}[Nu(x, t)] \quad (3.10)$$

O segundo passo envolve a representação da solução através de uma série infinita:

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(x, t) \quad (3.11)$$

onde o operador não linear pode ser escrito como:

$$Nu(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \quad (3.12)$$

onde A_n são os polinômios de Adomian que podem ser calculados pela seguinte expressão:

$$A_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{d\lambda^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right]_{\lambda=0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.13)$$

Usando as (Equações (3.11)) e (3.12) na (Equação (3.10)), a seguinte (Equação (3.14)) é obtida:

$$\mathcal{L} \left[\sum_{n=0}^{\infty} u_n(x, t) \right] = \frac{f(x)}{s} + \frac{g(x)}{s^2} + \frac{1}{s^2} \mathcal{L} [h(x, t)] - \frac{1}{s^2} \mathcal{L} \left[R \sum_{n=0}^{\infty} u_n(x, t) \right] - \frac{1}{s^2} \mathcal{L} \left[\sum_{n=0}^{\infty} A_n \right] \quad (3.14)$$

comparando ambos os lados da (Equação (3.14)),

$$\mathcal{L} [u_0(x, t)] = \frac{f(x)}{s} + \frac{g(x)}{s^2} + \frac{1}{s^2} \mathcal{L} [h(x, t)] = K(x, s) \quad (3.14a)$$

$$\mathcal{L} [u_1(x, t)] = -\frac{1}{s^2} \mathcal{L} [Ru_0(x, t)] - \frac{1}{s^2} \mathcal{L} [A_0] \quad (3.14b)$$

$$\mathcal{L} [u_2(x, t)] = -\frac{1}{s^2} \mathcal{L} [Ru_1(x, t)] - \frac{1}{s^2} \mathcal{L} [A_1] \quad (3.14c)$$

Em geral, a relação recursiva é dada por,

$$\mathcal{L} [u_{n+1}(x, t)] = -\frac{1}{s^2} \mathcal{L} [Ru_n(x, t)] - \frac{1}{s^2} \mathcal{L} [A_n], n \geq 0 \quad (3.14d)$$

Aplicando-se a transformada inversa de Laplace nas (Equações (3.14a)), (3.14b), (3.14c) e (3.14d), a relação recursiva é dada por,

$$u_0(x, t) = K(x, t) \quad (3.15)$$

$$u_{n+1}(x, t) = -\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{s^2} \mathcal{L} [Ru_n(x, t)] + \frac{1}{s^2} \mathcal{L} [A_n] \right], n \geq 0 \quad (3.16)$$

onde $K(x, t)$ representa a expressão que surge do termo fonte e das condições iniciais.

3.3 GITT

A GITT é um método híbrido bem conhecido que resolveu uma ampla classe de problemas diretos e inversos, principalmente na área de Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Cotta (1993). Para aplicar a GITT é escolhido um problema de autovalor associado, que possui condições de contorno semelhantes, chamado de Sturm-Liouville:

$$\psi_n''(y) + \beta_n^2(y) = 0, 0 < y < L_y \quad (3.17)$$

onde as condições de contorno são as mesmas do problema original,

$$\psi_n'(y) = 0, y = 0, L_y \quad (3.18)$$

cuja solução é dada por (autofunções),

$$\psi_n(y) = \cos(\beta_n y) \quad (3.19)$$

onde $\beta_n = \frac{n\pi}{L_y}$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) são as raízes positivas de $\text{sen}(\beta_n L_y) = 0$ (autovalores). Após aplicar os procedimentos tradicionais, surge o problema transformado. Assim, após a solução do problema transformado $c(x)$, tem-se a solução final dada por:

$$c(x, y) = \sum_0^{\infty} c_n(x) \psi_n(y) \quad (3.20)$$

3.4 Soluções da Equação de Difusão-Advecção

Neste ponto, se têm os aspectos matemáticos básicos para seguir com as soluções propostas no trabalho: problema bidimensional e tridimensional resolvidos considerando-se a derivada de Caputo e conformável.

A equação de difusão-advecção escrita na forma geral é dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + S \quad (3.21)$$

onde c representa a concentração do poluente; u , v e w são as velocidades médias do vento nas direções longitudinal, transversal e vertical, respectivamente. Da mesma forma, K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão nas direções longitudinal, transversal e vertical, respectivamente; S representa um termo fonte/sumidouro. Como, normalmente, todos os parâmetros dependem das variáveis x , y , z e t , algumas hipóteses simplificativas devem ser feitas para obtenção de uma solução analítica.

Considera-se o eixo x do sistema de coordenadas Cartesiano alinhado na direção da velocidade longitudinal média do vento u , o eixo y alinhado com a direção transversal da velocidade média do vento v , e o eixo z alinhado com a velocidade média do vento w em relação a direção vertical, com as seguintes hipóteses:

- i) estado estacionário, $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$;
- ii) as velocidades do vento v e w nas direções transversal e vertical, respectivamente, são nulas, $v, w = 0$;
- iii) o termo advectivo na direção x é muito maior que o termo difusivo na mesma direção, $u \frac{\partial c}{\partial x} \gg K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$;
- iv) sem reação química, $S = 0$ (equação linear);
- v) no caso em estudo, a velocidade do vento u na direção longitudinal é constante (normalmente são medidas experimentalmente em 10 m de altura) e os termos difusivos são dependentes apenas da variável espacial x , ou seja, $K_y = K_y(x)$, $K_z = K_z(x)$;
- vi) derivada fracionária somente no termo advectivo longitudinal, conforme Moreira *et al.* (2005), Goulart *et al.* (2017), $u \frac{\partial c}{\partial x} \rightarrow u \frac{\partial^\alpha c}{\partial x^\alpha}$.

Com as hipóteses acima, resulta

$$u \frac{\partial^\alpha c(x, y, z)}{\partial x^\alpha} = K_y(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2} + K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.22)$$

Assim, apesar de algumas hipóteses simplificativas no sentido de obter-se uma solução analítica, este trabalho propõe resolver a equação de difusão-advecção fracionária (bidimensional e tridimensional) utilizando-se os métodos GITT e LDM, representando um avanço importante em problemas de dispersão de poluentes atmosféricos.

3.4.1 Solução Bidimensional via Caputo

Inicialmente, é considerada a equação bidimensional dada por:

$$u \frac{{}^C \partial^\alpha c(x, z)}{\partial x^\alpha} = K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.23)$$

com $x > 0$, $0 < z < h$ (h é a altura da CLP); c é a concentração integrada lateralmente, C representa a derivada de Caputo, α representa a ordem fracionária do operador, u é a velocidade média longitudinal e K_z é o coeficiente de difusão vertical.

A parametrização aqui, por simplicidade, está apenas no coeficiente de difusão K_z . Embora o coeficiente de difusão usado neste trabalho dependa apenas da distância da fonte, a metodologia pode ser usada para coeficientes variáveis na direção vertical (u e K_z).

Assim, o coeficiente de difusão vertical depende somente da distância longitudinal da fonte, e é representado por:

$$K_z(x) = \left[\left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 u \right] x^\alpha = \omega x^\alpha \quad (3.24)$$

onde α tem ordem similar a ordem da derivada fracionária, Goulart *et al.* (2017) e σ_w é o desvio padrão da velocidade vertical.

Para obtenção da solução da (Equação (3.23)) é possível fazer uma mudança de variável da seguinte forma, Crank (1979), Moreira *et al.* (2014):

$$X^\alpha = \int_0^x x^\alpha (dx)^\alpha \quad (3.25)$$

Então, a (Equação (3.23)) pode ser reescrita como:

$$u \frac{{}^C \partial^\alpha c(x, z)}{\partial x^\alpha} = \omega \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (3.26)$$

Observa-se que a (Equação (3.26)) recai em uma equação com coeficiente de difusão e velocidade do vento constantes.

Para a solução da (Equação (3.26)) é necessário determinar as condições de contorno. Então, as usuais condições de fluxo nulo de poluentes na superfície (solo) e no topo da CLP são usadas:

$$\omega \frac{\partial c}{\partial z} = 0, z = 0 \quad (3.26a)$$

$$\omega \frac{\partial c}{\partial z} = 0, z = h \quad (3.26b)$$

onde h é a altura da CLP. Além disto, existe uma fonte com taxa de emissão, Q , localizada na altura da fonte, H_s :

$$c(0, z) = \frac{Q}{u} \delta(z - H_s), x = 0 \quad (3.26c)$$

onde a função delta de Dirac, $\delta(\cdot)$, pode ser aproximada pela seguinte expressão:

$$\delta(z - H_s) = \frac{1}{h} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (3.27)$$

onde os autovalores são dados por:

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{h}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.28)$$

Logo, a condição de fonte pode ser reescrita como:

$$c(0, z) = \frac{Q}{uh} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (3.29)$$

Seguindo-se o método, aplicando-se a transformada de Laplace na variável X na (Equação (3.26)) com a definição de Caputo, obtém-se:

$$u \left[s^\alpha \hat{c}(s, z) - s^{\alpha-1} c(0, z) \right] = \mathcal{L} \left[\omega \frac{\partial^2 c(X, z)}{\partial z^2} \right] \quad (3.30)$$

rearranjando-se a equação,

$$\hat{c}(s, z) = \frac{c(0, z)}{s} + \frac{\omega}{us^\alpha} \mathcal{L} \left[\frac{\partial^2 c(X, z)}{\partial z^2} \right] \quad (3.31)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Eq. (3.31):

$$c(X, z) = c_0 + \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\omega}{us^\alpha} \mathcal{L} \left[\frac{\partial^2 c(X, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (3.32)$$

onde c_0 é dado por (Equação (3.29)) ($c_0 = c(0, z)$). Portanto, para se obter os outros termos da solução em séries,

$$c_{n+1} = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\omega}{us^\alpha} \mathcal{L} \left[\frac{\partial^2 c(X, z)}{\partial z^2} \right] \right], n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.33)$$

Logo, para se obter o termo c_1 :

$$c_1 = -\frac{2Q\omega}{uh} \frac{X^\alpha}{u \Gamma(\alpha + 1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (3.34)$$

onde Γ é a função Gama. Para obter-se o termo c_2 :

$$c_2 = \frac{2Q\omega^2}{uh} \frac{X^{2\alpha}}{u^2 \Gamma(2\alpha + 1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (3.35)$$

e assim, sucessivamente. Então, agrupando-se os demais termos,

$$c(X, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \left[1 - \frac{\omega \lambda_n^2}{u} \frac{X^\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)} + \frac{\omega^2 \lambda_n^4}{u^2} \frac{X^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha + 1)} - \dots \right] \quad (3.36)$$

logo,

$$c(X, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_{\alpha} \left(-\frac{\omega X^{\alpha}}{u} \lambda_n^2 \right) \quad (3.37)$$

retornando para a variável x ,

$$c(x, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_{\alpha} \left(-\frac{\omega \int_0^x f(\xi) (d\xi)^{\alpha}}{u} \lambda_n^2 \right) \quad (3.38)$$

onde E_{α} é a função de Mittag-Leffler, a qual é intrínseca a solução de problemas com derivadas fracionárias. Observa-se que, se $f(x) = x^{\alpha}$ Jumarie (2008),

$$\int_0^x \xi^{\alpha} (d\xi)^{\alpha} = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(2\alpha + 1)} x^{2\alpha}, 0 < \alpha < 1$$

$$\int_0^x (d\xi)^{\alpha} = x^{\alpha}, 0 < \alpha < 1$$

Portanto, obtém-se a solução final para o problema bidimensional dada por:

$$c(x, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_{\alpha} \left[-\frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(2\alpha + 1)} \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 x^{2\alpha} \lambda_n^2 \right] \quad (3.39)$$

Observa-se prontamente que a (Equação (3.39)) retorna a solução de ordem inteira se $\alpha = 1$, tal que,

$$c(x, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_1 \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 x^2 \lambda_n^2 \right] \quad (3.40)$$

onde,

$$E_1 \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 x^2 \lambda_n^2 \right] = \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 x^2 \lambda_n^2 \right]$$

Finalmente, como esperado, a (Equação (3.39)) é uma solução mais geral.

3.4.2 Solução Tridimensional via Caputo

Para contextualizar o problema, é oportuno reescrever a (Equação (3.22)). Logo,

$$u \frac{{}^C \partial^\alpha c(x, y, z)}{\partial x^\alpha} = K_y(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2} + K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.41)$$

com $0 < z < h$, $0 < y < L_y$ e $x > 0$, onde L_y representa um comprimento na direção y que satisfaça a condição de contorno, c é a concentração de poluentes, C indica a derivada conforme Caputo, α representa a ordem do operador fracionário, u é a velocidade média longitudinal do vento, e K_y e K_z são os coeficientes de difusão lateral e vertical, respectivamente.

Seguindo a proposta do trabalho, os coeficientes de difusão lateral e vertical dependem somente da distância longitudinal

$$K_y(x) = \left(\frac{\sigma_v}{u} \right)^2 u x^\alpha = \beta x^\alpha \quad (3.41a)$$

$$K_z(x) = \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 u x^\alpha = \omega x^\alpha \quad (3.41b)$$

onde α tem ordem similar a ordem da derivada fracionária, Goulart *et al.* (2017), β e ω são constantes, σ_v e σ_w (dados medidos experimentalmente), são os desvios padrões das velocidades lateral e vertical, respectivamente.

Além de ser uma solução tridimensional, aqui aparece outra novidade com relação à solução bidimensional anterior, pois toda equação diferencial fracionária fica com inconsistência dimensional. Desta forma, neste primeiro momento, para ser consistente dimensionalmente, segue-se a sugestão dada no trabalho de Gómez-Aguilar *et al.* (2016),

onde é introduzido um parâmetro auxiliar ϕ , Moreira & Santos (2019):

$$\frac{d}{dx} \rightarrow \frac{1}{\phi^{1-\alpha}} \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \quad (3.42)$$

sendo a relação ((3.42)) verdadeira se o parâmetro ϕ tiver dimensão de comprimento. Portanto, a representação fracional da (Equação (3.41)) com a inclusão dos coeficientes de difusão (Equação (3.41a)) e (Equação (3.41b)), juntamente com o parâmetro ϕ , é dada por:

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} \frac{\partial^\alpha c(x, y, z)}{\partial x^\alpha} = \beta x^\alpha \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2} + \omega x^\alpha \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.43)$$

A fração $\frac{u}{\phi^{u-\alpha}}$ afeta o termo advectivo, aumentando ou diminuindo a intensidade da velocidade do vento. Em situações físicas típicas em que o nível de fracionalidade é baixo, ou seja, a ordem das derivadas fracionárias α dos termos correspondentes das equações dinâmicas se desvia levemente de um valor inteiro n (no caso, 1), que é o caso do proposto trabalho, o termo $\phi^{1-\alpha}$ tem influência insignificante na velocidade do vento u . Portanto, assume-se que $\phi = 1$ m, tornando o lado esquerdo da (Equação (3.43)) dimensionalmente correto e a metodologia proposta permite a solução do problema sem perda de generalidade.

A metodologia proposta pode ser usada para coeficientes variáveis. Entretanto, para obter-se a solução da (Equação (3.43)) em uma forma geral, é possível fazer uma mudança de variável, Crank (1979), Moreira *et al.* (2014)

$$X^\alpha = \int_0^x \xi^\alpha (d\xi)^\alpha \quad (3.44)$$

Então, a (Equação (3.41)) pode ser reescrita como:

$$\frac{u}{\phi^{u-\alpha}} \frac{\partial^\alpha c(x, y, z)}{\partial x^\alpha} = \beta \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2} + \omega \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2} \quad (3.45)$$

Observa-se que a (Equação (3.45)) recai no caso em que os coeficientes são constantes. Para a solução da (Equação (3.45)) é necessário determinar as condições de contorno e de fonte. Assim, são usadas as condições usuais de fluxo nulo de poluentes na

superfície e no topo do domínio vertical:

$$\omega \frac{\partial c}{\partial z} = 0, z = 0, h \quad (3.45a)$$

Além disto, tem-se a seguinte condição na direção transversal (L_y é uma distância longe da fonte):

$$\frac{\partial c}{\partial y} = 0, y = 0, L_y \quad (3.45b)$$

e uma fonte com taxa de emissão, Q , na altura da fonte, H_s :

$$c(0, y, z) = \frac{Q}{u} \delta(z - H_s) \delta(y - y_0) \quad (3.46)$$

onde H_s e y_0 indicam a posição da fonte. Novamente, por conveniência, a função delta de Dirac na direção vertical pode ser aproximada pela seguinte expressão:

$$\delta(z - H_s) = \frac{1}{h} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (3.47)$$

sendo os autovalores dados por,

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{h}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.48)$$

Então, a condição de fonte pode ser reescrita como:

$$c(0, y, z) = \frac{Q}{uh} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \delta(y - y_0) \quad (3.49)$$

Na metodologia utilizada, o método GITT é aplicado primeiro na direção y . A aplicação formal do método GITT começa com a escolha do problema de autovalor associado (problema auxiliar) Cotta (1993), Cotta & Mikhailov (1997):

$$\psi_i''(y) + \lambda_i^2 \psi_i(y) = 0, 0 < y < L_y \quad (3.50)$$

com as condições de contorno,

$$\psi_i' = 0, y = 0, L_y \quad (3.51)$$

Para este tipo de problema de Sturm-Liouville (S-L), a solução é dada por $\psi_i(y) = \cos(\lambda_i y)$, onde λ_i são as raízes positivas da expressão $\sin(\lambda_i L_y) = 0$. Então, $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_i = i\pi/L_y$. Observe que as funções ψ_i e λ_i conhecidas respectivamente como autofunções e autovalores associados ao problema de S-L, atendem à seguinte condição de ortonormalidade:

$$\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}} N_n^{\frac{1}{2}}} \int_v \psi_m \psi_n dv = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \quad (3.52)$$

onde

$$N_m = \int_v \psi_m^2(y) dv \quad (3.53)$$

Seguindo o formalismo GITT, o primeiro passo é expandir a variável $c(X, y, z)$,

$$c(X, y, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{c_i(X, z) \psi_i(y)}{\partial z^2 N_i^{\frac{1}{2}}} \quad (3.54)$$

Substituindo-se a (Equação (3.54)) na (Equação (3.45)), resulta,

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^\alpha c_i(X, z)}{\partial X^\alpha} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} = \beta \sum_{i=0}^{\infty} c_i(X, z) \frac{\psi_i''(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} + \omega \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 c_i(X, z)}{\partial z^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \quad (3.55)$$

O próximo passo é aplicar o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}}$ na (Equação (3.55)), observando que $\psi_i''(y) = -\lambda_i^2 \psi_i$. Além disto, usando a propriedade de ortonormalidade, a (Equação

(3.55)) pode ser escrita como:

$$\frac{u}{\phi^{u-\alpha}} \frac{\partial^\alpha c_i(X, z)}{\partial X^\alpha} = \omega \frac{\partial^2 c_i(X, z)}{\partial z^2} - \beta \lambda_i^2 c_i(X, z); 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.56)$$

onde as condições de contorno (Equação (3.45a)) permanecem inalteradas. Entretanto, a condição de fonte é agora escrita como,

$$u \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{L_y} c_i(0, y, z) \frac{\psi_i \psi_j}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} dy = Q \delta(z - H_s) \int_0^{L_y} \frac{\delta(y - y_0) \psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}} dy \quad (3.57)$$

então,

$$c(0, z) = \frac{Q}{uh} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \frac{\psi_i(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \quad (3.58)$$

O próximo passo é usar o método LDM para obter-se a solução do problema transformado $c_i(X, z)$. Deste modo, o primeiro passo é aplicar a transformada de Laplace na (Equação (3.56)), na variável X , obtendo-se:

$$\mathcal{L} \left[\frac{u}{\phi^{u-\alpha}} \frac{\partial^\alpha c_i(X, z)}{\partial X^\alpha} \right] = \mathcal{L} \left[\omega \frac{\partial^2 c_i(X, z)}{\partial z^2} \right] - \mathcal{L} [\beta \lambda_i^2 c_i(X, z)] \quad (3.59)$$

logo,

$$\frac{u}{\phi^{u-\alpha}} [s^\alpha c_i(s, z) - s^{\alpha-1} c(0, z)] = \mathcal{L} \left[\omega \frac{\partial^2 c_i(X, z)}{\partial z^2} \right] - \mathcal{L} [\beta \lambda_i^2 c_i(X, z)] \quad (3.60)$$

Reorganizando-se a (Equação (3.60)) para obter-se $c_i(s, z)$,

$$c_i(s, z) = \frac{1}{s} c(0, z) + \frac{\phi^{1-\alpha}}{us^\alpha} \mathcal{L} \left[\omega \frac{\partial^2 c_i(X, z)}{\partial z^2} \right] - \frac{\phi^{1-\alpha}}{us^\alpha} \mathcal{L} [\beta \lambda_i^2 c_i(X, z)] \quad (3.61)$$

Aplicando-se a transformada inversa de Laplace na (Equação (3.61)), e usando-se o método padrão, em que a solução é representada como uma série infinita,

$$c_i(X, z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{i(n)}(X, z) \quad (3.62)$$

resulta,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} c_{i(n)}(X, z) = c(0, z) + \mathcal{L}^{-1} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^{1-\alpha}}{us^\alpha} \mathcal{L} \left[\omega \frac{\partial^2 c_{i(n)}(X, z)}{\partial z^2} \right] \right] - \\ - \mathcal{L}^{-1} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^{1-\alpha}}{us^\alpha} \mathcal{L} \left[\beta \lambda_i^2 c_{i(n)}(X, z) \right] \right] \end{aligned} \quad (3.63)$$

Comparando-se ambos os lados da (Equação (3.63)), logo se tem $c_{i(0)}(X, z) = c(0, z)$ dado pela (Equação (3.58)). Portanto, para obter-se os outros termos da solução em séries tem-se a fórmula recursiva,

$$c_{i(n)}(X, z) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \omega}{us^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 c_{i(n-1)}(X, z)}{\partial z^2} \right\} \right] - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \beta}{us^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \lambda_i^2 c_{i(n-1)}(X, z) \right\} \right] \\ , n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.64)$$

então,

$$c_{i(1)}(X, z) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \omega}{us^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 c_{i(0)}(X, z)}{\partial z^2} \right\} \right] - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \beta}{us^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \lambda_i^2 c_{i(0)}(X, z) \right\} \right] \quad (3.65)$$

$$c_{i(2)}(X, z) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \omega}{us^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 c_{i(1)}(X, z)}{\partial z^2} \right\} \right] - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \beta}{us^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \lambda_i^2 c_{i(1)}(X, z) \right\} \right] \quad (3.66)$$

$$c_{i(3)}(X, z) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \omega}{u s^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 c_{i(2)}(X, z)}{\partial z^2} \right\} \right] - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\phi^{1-\alpha} \beta}{u s^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \lambda_i^2 c_{i(2)}(X, z) \right\} \right] \quad (3.67)$$

⋮

Logo, agrupando-se os termos resulta:

$$\begin{aligned} c_i(X, z) = & \frac{Q}{uh} \frac{\psi(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \left\{ 1 - \frac{X^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \frac{\phi^{1-\alpha} \beta \lambda_i^2}{u} + \frac{X^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \left(\phi^{1-\alpha} \frac{\beta \lambda_i^2}{u} \right)^2 + \dots \right\} + \\ & + \frac{2Q}{uh} \frac{\psi(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \cdot \\ & \cdot \left\{ 1 - \frac{X^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \left(\phi^{1-\alpha} \frac{(\omega \lambda_n^2 + \beta \lambda_i^2)}{u} \right) + \frac{X^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \left(\phi^{1-\alpha} \frac{(\omega \lambda_n^2 + \beta \lambda_i^2)}{u} \right)^2 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (3.68)$$

onde Γ é a função Gama. Portanto, a solução é dada por:

$$\begin{aligned} c_i(X, z) = & \frac{Q}{uh} \frac{\psi(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} E_\alpha \left[-X^\alpha \frac{\phi^{1-\alpha} \beta \lambda_i^2}{u} \right] + \\ & + \frac{2Q}{uh} \frac{\psi(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_\alpha \left[-X^\alpha \left(\phi^{1-\alpha} \frac{(\omega \lambda_n^2 + \beta \lambda_i^2)}{u} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.69)$$

resultando,

$$\begin{aligned} c_i(X, z) = & \frac{Q}{uh} \frac{\psi(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} E_\alpha \left[-X^\alpha \frac{\phi^{1-\alpha} \beta \lambda_i^2}{u} \right] \cdot \\ & \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_\alpha \left[-X^\alpha \frac{\phi^{1-\alpha} \omega \lambda_n^2}{u} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.70)$$

Retornando para a variável x ,

$$c_i(x, z) = \frac{Q}{uh} \frac{\psi(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} E_\alpha \left[- \int_0^x \xi^\alpha (d\xi)^\alpha \frac{\phi^{1-\alpha} \beta \lambda_i^2}{u} \right] \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_\alpha \left[- \int_0^x \xi^\alpha (d\xi)^\alpha \frac{\phi^{1-\alpha} \omega \lambda_n^2}{u} \right] \right\} \quad (3.71)$$

onde, Jumarie (2008)

$$\int_0^x \xi^\gamma (d\xi)^\alpha = \frac{\Gamma(\alpha + 1) \Gamma(\gamma + 1)}{\Gamma(\alpha + \gamma + 1)} x^{\alpha + \gamma}, 0 < \alpha < 1 \quad (3.72)$$

e, se $\gamma = \alpha$,

$$\int_0^x \xi^\alpha (d\xi)^\alpha = \frac{\Gamma(\alpha + 1) \Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(2\alpha + 1)} x^{2\alpha}, 0 < \alpha < 1 \quad (3.73)$$

se, $\gamma = 1$ na (Equação (3.72)), resulta,

$$\int_0^x \xi (d\xi)^\alpha = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(\alpha + 2)} x^{\alpha + 1}, 0 < \alpha < 1 \quad (3.74)$$

se, $\gamma = 0$,

$$\int_0^x (d\xi)^\alpha = x^\alpha, 0 < \alpha < 1 \quad (3.75)$$

Finalmente, de acordo com a (Equação (3.54)) ($\psi(y_0) = \psi(0) = 1$), obtém-se a solução tridimensional na forma final, dada por,

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{uh} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_i y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} E_\alpha \left[- \frac{\Gamma(\alpha + 1) \Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(2\alpha + 1)} \left(\frac{\phi^{1-\alpha} \sigma_v}{u} \right)^2 x^{2\alpha} \lambda_i^2 \right] \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_\alpha \left[- \frac{\Gamma(\alpha + 1) \Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(2\alpha + 1)} \left(\frac{\phi^{1-\alpha} \sigma_w}{u} \right)^2 x^{2\alpha} \lambda_n^2 \right] \right\} \quad (3.76)$$

Além disto, podem ser citados dois casos especiais:

i) (Equação (3.76)) com $\alpha = 1$ (solução de ordem inteira):

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{uh} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_i y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp \left[- \left(\frac{\sigma_v}{u} \right)^2 \frac{x^2}{2} \lambda_i^2 \right] \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 \frac{x^2}{2} \lambda_n^2 \right] \right\} \quad (3.77)$$

ii) (Equação (3.76)) com $y = 0$, $z = 0$, $H_s = 0$ (fonte ao nível do solo), e $\alpha = 1$:

$$c(x, 0, 0) = \frac{Q}{uh} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}}} \cdot \exp \left[- \left(\frac{\sigma_v}{u} \right)^2 \frac{x^2}{2} \lambda_i^2 \right] \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 \frac{x^2}{2} \lambda_n^2 \right] \right\} \quad (3.78)$$

A solução dada pela (Equação (3.76)) representa um avanço importante nas soluções analíticas da equação fracionária de difusão-advecção usando a combinação de GITT e LDM, porque é uma solução mais geral, além de ser uma nova metodologia que pode ser aplicada em outras áreas.

3.4.3 Solução Bidimensional via Derivada Conformável

Para ser consistente dimensionalmente, segue-se também a sugestão dada no trabalho de Gomez-Aguilar et al., (2016), onde é introduzido um parâmetro auxiliar ϕ dado por Moreira & Santos (2019), conforme dado pela (Equação (3.42)):

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} \frac{\partial^\alpha c(x, z)}{\partial x^\alpha} = K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.79)$$

Logo, de acordo com a (Equação (3.7)) que representa a derivada conformável, substitui-se na (Equação (3.79)), como segue:

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} x^{1-\alpha} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} = K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (3.80)$$

Para ter mais rigor no aspecto dimensional, assume-se o seguinte coeficiente de difusão vertical, a ser aplicado na (Equação (3.80)) dependente somente da distância

longitudinal da fonte dado por Moreira & Moret (2018):

$$K_z(x) = \left(\frac{\sigma_w}{u}\right)^2 ux = \omega x \quad (3.81)$$

onde $\omega = \frac{\sigma_w^2}{u}$, sendo σ_w o desvio padrão da velocidade vertical (dados experimentais) Arya (1995). Logo, fazendo-se as devidas substituições, resulta:

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} = \frac{\omega x}{x^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (3.82)$$

rearranjando,

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} = \omega x^\alpha \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (3.83)$$

usando uma mudança de variável dada por Moreira *et al.* (2014),

$$X = \int_0^x x^\alpha dx = \frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} \quad (3.84)$$

Resultando na seguinte (Equação (3.85)) a ser resolvida:

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} \frac{\partial c(X, z)}{\partial X} = \omega \frac{\partial^2 c(X, z)}{\partial z^2} \quad (3.85)$$

Observa-se que a (Equação (3.85)) é o caso em que os coeficientes são constantes, similar ao problema representado pela (Equação (3.26)). A diferença está no fato da (Equação (3.85)) não ser mais fracionária, mas sim, uma equação de ordem inteira. Assim, assumem-se as mesmas condições de contorno e de fonte dadas pelas (Equações (3.26a)), (3.26b) e (3.26c).

Usando a mesma metodologia de solução, aplica-se inicialmente a transformada de Laplacena (Equação (3.85)),

$$\mathcal{L} \left[\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} \frac{\partial c(X, z)}{\partial X} \right] = \mathcal{L} \left[\omega \frac{\partial^2 c(X, z)}{\partial z^2} \right] \quad (3.86)$$

seguindo os passos anteriores, obtém-se a seguinte equação solução:

$$c(x, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \exp\left(\phi^{(1-\alpha)} \frac{\omega}{u} \frac{x^{\alpha+1}}{(\alpha+1)} \lambda_n^2\right) \quad (3.87)$$

De fato, a solução utilizando-se a derivada fracionária gera uma Mittag-Lefflere, uma equação conformável, gera uma função exponencial. Este é um resultado bastante interessante a ser explorado, tendo em vista que a função M-L é mais geral que a função exponencial, ou seja, a transformação de uma equação fracionária em uma de ordem inteira não resultou em uma solução idêntica.

3.4.4 Solução Tridimensional via Derivada Conformável

De modo idêntico a solução bidimensional usando derivadas conformáveis, tem-se a seguinte equação,

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} x^{\alpha-1} \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x^\alpha} = K_y(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2} + K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.88)$$

Assim, para uma maior consistência dimensional assumem-se os seguintes coeficientes de difusão:

$$K_y(x) = \left(\frac{\sigma_v}{u}\right)^2 u x^\alpha = \beta x \quad (3.89)$$

$$K_z(x) = \left(\frac{\sigma_w}{u}\right)^2 u x^\alpha = \omega x \quad (3.90)$$

onde β e ω são constantes, σ_v e σ_w (dados medidos experimentalmente), são os desvios padrão da velocidade lateral e vertical, respectivamente. Portanto,

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} x^{\alpha-1} \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x^\alpha} = \beta x \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2} + \omega x \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.91)$$

Reagrupando-se os termos e usando a mudança de variável,

$$X^\alpha = \int_0^x x^\alpha dx = \frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} \quad (3.92)$$

Assim, a Equação (3.92)) pode ser reescrita como:

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}} x^{\alpha-1} \frac{\partial c(X, y, z)}{\partial x^\alpha} = \beta \frac{\partial^2 c(X, y, z)}{\partial y^2} + \omega \frac{\partial^2 c(X, y, z)}{\partial z^2} \quad (3.93)$$

Observa-se novamente que é caso de coeficientes constantes e a equação é de ordem inteira. Desta maneira, as condições usuais de fluxo zero de poluentes na superfície e no topo do domínio vertical são usadas, na direção transversal, incluindo a condição de fonte usada no problema tridimensional anterior. A solução resultante da (Equação (3.93)), do problema transformado, com as respectivas condições é dada por:

$$c_i(X, z) = \frac{Q}{uh} \frac{\psi(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \exp \left[-\phi^{1-\alpha} X \frac{\beta \lambda_i^2}{u} \right] \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \exp \left[-\phi^{1-\alpha} X \frac{\omega \lambda_n^2}{u} \right] \right\} \quad (3.94)$$

Retornando-se a variável x , tomando-se a solução definida pela (Equação (3.94)), finalmente se tem,

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{uh} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_i y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \exp \left[-\phi^{1-\alpha} \left(\frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} \right) \left(\frac{\sigma_v}{u} \right)^2 \lambda_i^2 \right] \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \exp \left[-\phi^{1-\alpha} \left(\frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} \right) \left(\frac{\sigma_w}{u} \right)^2 \lambda_n^2 \right] \right\} \quad (3.95)$$

Observa-se novamente, como esperado, uma solução com exponenciais tradicionais. Todas as constantes importantes das derivadas fracionárias estão presentes de forma explícita: o parâmetro fracionário α e o parâmetro de ajuste dimensional ϕ . Contudo, os procedimentos para a análise da performance e para validação da solução obtida foram feitos através de simulações, com os dados do tradicional experimento de Copenhagen. Cabe ressaltar, que esta solução é a primeira da literatura obtida com derivadas conformáveis em problemas atmosféricos.

Resultados Numéricos

4.1 *Dados Experimentais*

Para avaliar o desempenho dos modelos estudados, os dados gerados simulados são comparados com os dados observados nos experimentos de Copenhagen. Os experimentos de dispersão, descritos em Gryning & Lyck (1984), Gryning *et al.* (1987), consistiram da liberação na atmosfera do traçador SF₆ (hexafluoreto de enxofre) na região ao norte de Copenhagen. O SF₆, um traçador de gás inerte, foi liberado de uma torre a uma altura de 115 m e coletado próximo ao nível do solo em distâncias de 2 a 6 km da fonte. O tempo de amostragem foi de 1 h. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de 0,6 m. As medidas meteorológicas incluíram turbulência na altura da liberação do traçador sendo que todos os experimentos foram realizados durante o dia em condições atmosféricas moderadamente convectivas. Importante frisar que este experimento fornece dados de concentração bidimensional (integrada lateralmente) e tridimensional.

4.2 *Simulações Bidimensionais*

Os parâmetros meteorológicos para este experimento com dados bidimensionais de concentração são apresentados na Tabela 4.1, a seguir. Observe que, neste experimento, a concentração integrada lateralmente foi normalizada pela taxa de emissão (c/Q).

Tabela 4.1: Parâmetros meteorológicos durante o experimento de Copenhagen.

Exp	$U_{10}(ms^{-1})$	$U_{115}(ms^{-1})$	$h (m)$	$\sigma_w(ms^{-1})$	$x (m)$	$c/Q(10^{-4}sm^{-2})$
1	2,1	3,4	1980	0,83	1900	6,28
					3700	2,31
2	4,9	10,6	1920	1,07	2100	5,38
					4200	2,95
3	2,4	5,0	1120	0,68	1900	8,2
					3700	6,22
					5400	4,3
4	2,5	4,6	390	0,47	4000	11,66
5	3,1	6,7	820	0,71	2100	6,72
					4200	5,84
					5100	4,97
6	7,2	13,2	1300	1,33	2000	3,96
					4200	2,22
					5900	1,83
7	4,1	7,6	1850	0,87	2000	6,7
					4100	3,25
					5300	2,23
8	4,2	9,4	810	0,72	1900	4,16
					3600	2,02
					5300	1,52
9	5,1	10,5	2090	0,98	2100	4,58
					4200	3,11
					6000	2,59

Fonte: Própria

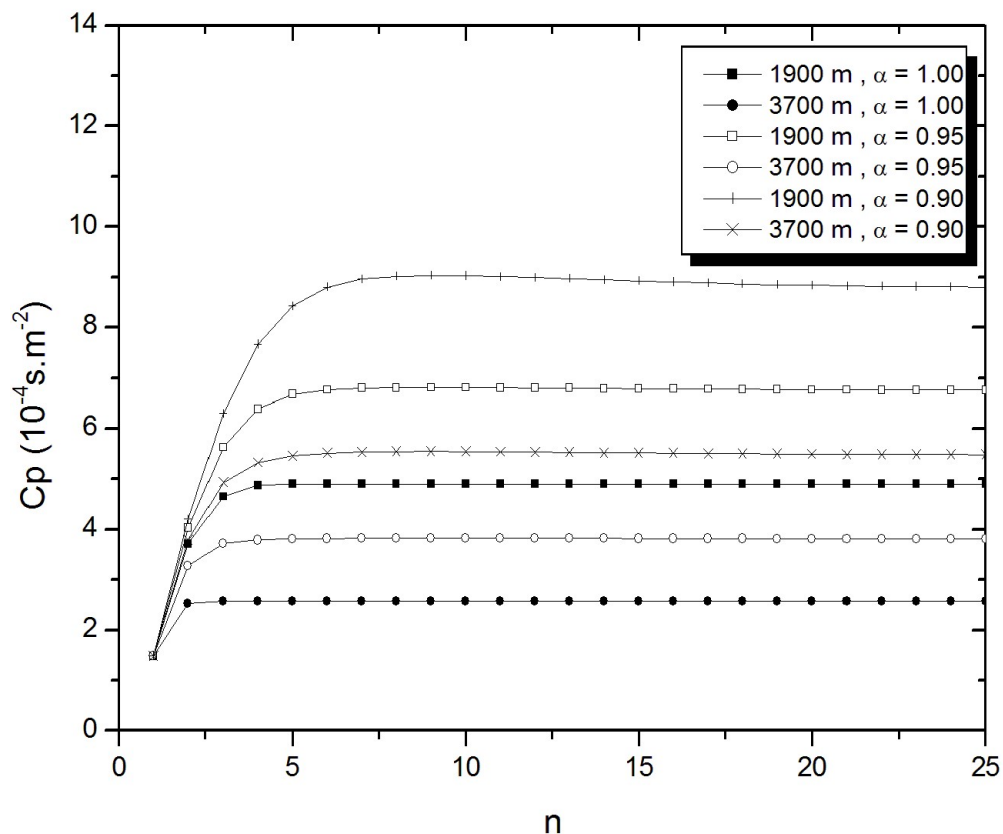
Na Tabela 4.1, os parâmetros meteorológicos durante o experimento de Copenhagen são: U_{10} é a velocidade do vento médio medido a 10 m de altura; U_{115} é a velocidade do vento médio medido a 115 m; h é a altura da CLP; σ_w é o desvio padrão da velocidade vertical; x é a distância longitudinal da fonte; c/Q é a concentração integrada lateralmente normalizada pela taxa de emissão.

Nota-se na Tabela 4.1 apresentado que é feita uma análise da convergência da solução dada pela (Equação (3.39)) com os dados do experimento 1.

4.2.1 Derivada Fracionária de Caputo

A Figura 4.1 a seguir mostra a convergência numérica da solução proposta para a concentração simulada ao nível do solo para diferentes distâncias da fonte (1900 e 3700 m), considerando-se a velocidade do vento, em função do número de termos do somatório e diferentes valores do parâmetro fracionário α (1,00; 0,95 e 0,90).

Figura 4.1: Convergência da série no modelo usando o experimento 1 de Copenhagen, com velocidade do vento U_{115}

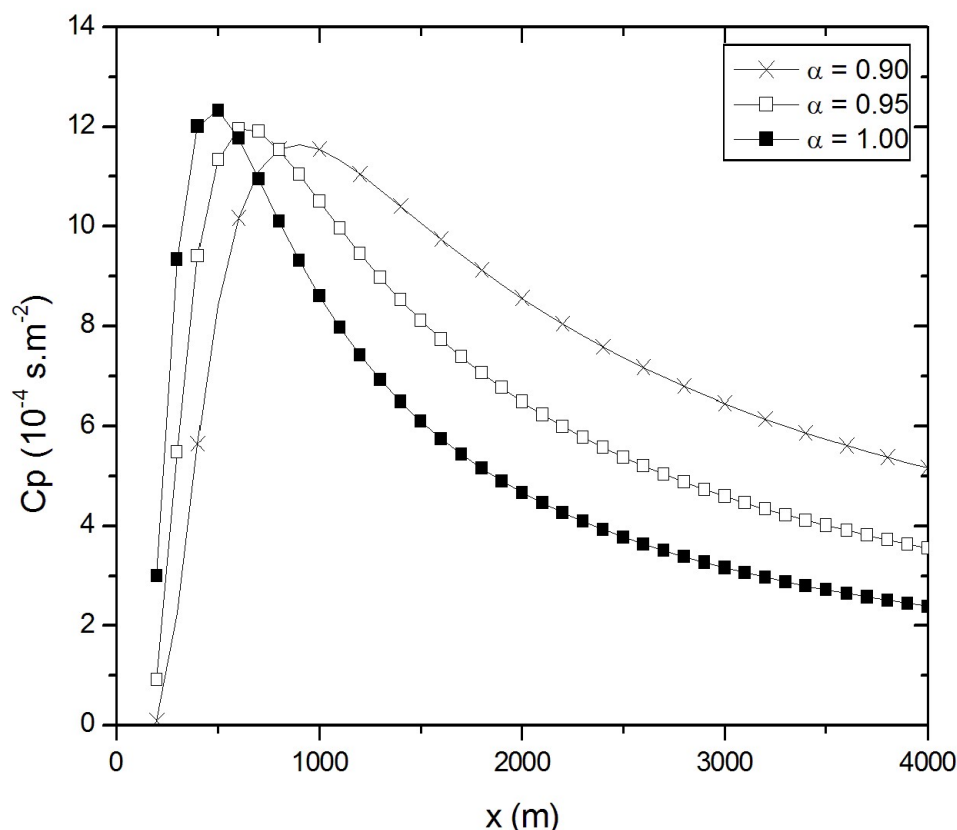


Fonte: Própria

A Figura 4.1 mostra uma rápida convergência da série para concentrações ao nível do solo com o aumento do número de termos n . Além disso, observa-se que, com a diminuição do parâmetro α e distâncias menores da fonte, é necessário aumentar o número de termos do somatório para obter-se a convergência desejada.

A segunda análise da solução dada pela (Equação (3.39)) é a verificação da influência do parâmetro α , o qual está intimamente relacionado ao termo advectivo que representa o transporte de massa devido ao vento médio longitudinal. Nesse sentido, a Figura 4.1 mostra a concentração em função da distância da fonte para diferentes ordens fracionárias da derivada: α (0,90; 0,95 e 1,00). (experimento 1 dos dados de Copenhagen com U_{115})

Figura 4.2: Concentração integrada lateralmente ao nível do solo em função da distância da fonte, considerando diferentes parâmetros fracionários



Fonte: Própria

Observa-se que a solução com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte altera a posição do pico de concentração. Além disso, está claro que o parâmetro α influencia o processo de dispersão. Para a simulação de ordem inteira ($\alpha = 1,00$), é observada uma concentração mais alta de poluentes na região próxima à fonte, que tem a tendência de diminuir com o aumento da distância da fonte. À medida que α diminui, percebe-se que o pico de concentração diminui e muda de posição (a localização do pico de concentração é um dos parâmetros mais importantes no contexto da poluição atmosférica), tendendo a manter a concentração em altos níveis por maiores distâncias.

A próxima análise é uma avaliação estatística das simulações do modelo para verificar qual valor de apresenta os melhores resultados. As Tabelas 4.2 e 4.3 mostram alguns desempenhos dos resultados do modelo usando o software de avaliação estatística, descrito por Hanna (1989) (*bootstrap resampling*), com os parâmetros estatísticos definido da seguinte maneira:

$$\text{NMSE (erro quadrático médio normalizado)} = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_p} \cdot \overline{C_o},$$

$$\text{FAT2 (fator de 2), fração de dados entre } = 0,5 \leq (C_p/C_o) \leq 2$$

$$\text{COR (coeficiente de correlação)}, = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \cdot \sigma_p},$$

$$\text{FB (desvio fracional)} = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0.5 (\overline{C_o} + \overline{C_p})},$$

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

onde os subscritos o e p referem-se às quantidades observadas e previstas, respectivamente, e a barra superior indica um valor médio. O índice estatístico FB determina se as quantidades previstas subestimam ou superestimam as observadas. O índice estatístico $NMSE$ representa a dispersão do modelo em relação à dispersão dos dados. Espera-se que os melhores resultados tenham valores próximos de zero para os índices $NMSE$, FB e FS e próximos de 1 para os índices COR e $FAT2$.

Nesse ponto, deve-se notar que o experimento de Copenhagen fornece dados de velocidade do vento em duas alturas distintas, medidas a 10 m e 115 m. Portanto, é possível analisar a solução com essas duas alturas separadamente.

A Tabela 4.2 mostra os resultados estatísticos do modelo representado pela (Equação (3.39)), considerando diferentes valores de α e vento medido na altura de 115 m.

Tabela 4.2: Indicadores estatísticos de desempenho do modelo para diferentes valores de α com velocidade do vento U_{115} .

Modelo	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
$\alpha=1,00$	0,36	0,84	0,83	0,43	0,57
$\alpha=0,99$	0,31	0,83	0,87	0,38	0,55
$\alpha=0,98$	0,26	0,83	0,91	0,33	0,53
$\alpha=0,97$	0,22	0,82	0,96	0,28	0,51
$\alpha=0,96$	0,19	0,82	1,00	0,23	0,49
$\alpha=0,95$	0,16	0,81	1,00	0,19	0,46
$\alpha=0,94$	0,14	0,81	1,00	0,14	0,43
$\alpha=0,93$	0,13	0,80	0,96	0,10	0,42
$\alpha=0,92$	0,12	0,79	0,87	0,07	0,38
$\alpha=0,91$	0,12	0,78	0,87	0,03	0,36
$\alpha=0,90$	0,12	0,76	0,87	-0,02	0,28

Fonte: Própria

A Tabela 4.2 indica que o melhor resultado ocorre para $\alpha = 0,94$, com menor $NMSE$ (0,14) e $FAT2$ de 100% (1,00). O pior resultado ocorre com $\alpha = 1,00$, que representa a derivada de ordem inteira, com um $NMSE$ mais alto (0,36) e um $FAT2$ mais baixo (83%).

A Tabela 4.3 mostra os resultados estatísticos do modelo considerando o vento

medido a 10 m. Além de mostrar as concentrações calculadas a partir do presente modelo, são mostrados também os resultados de um modelo Gaussiano e da solução obtida no trabalho de Sharan & Modani (2006), o qual considera também o coeficiente de difusão dependente da distância da fonte ($K(x)$), aqui denominado modelo S-M. Essa comparação é possível porque os resultados do modelo S-M e do modelo Gaussiano consideram a velocidade do vento a 10 m de altura.

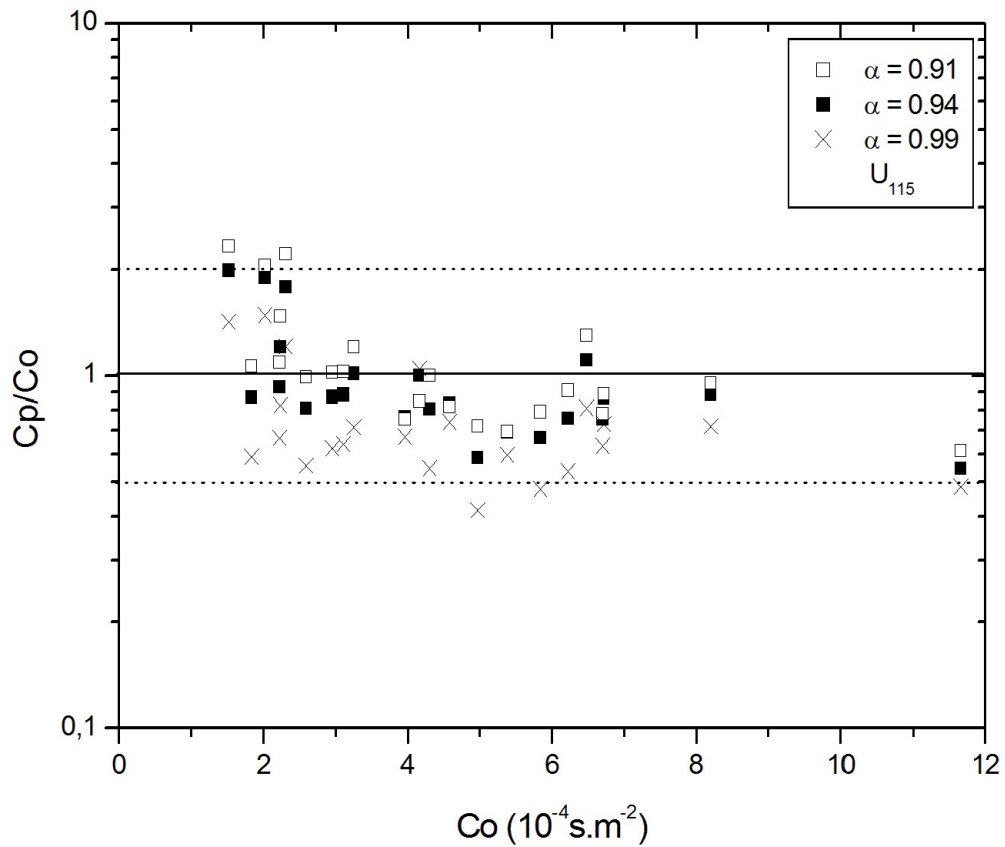
Tabela 4.3: Indicadores estatísticos de desempenho dos modelos para diferentes valores de α com velocidade do vento U_{10} .

Modelo	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
$\alpha=1,00$	0,12	0,90	1,00	0,22	0,20
$\alpha=0,99$	0,10	0,90	1,00	0,18	0,18
$\alpha=0,98$	0,08	0,90	1,00	0,13	0,16
$\alpha=0,97$	0,07	0,90	0,96	0,07	0,15
$\alpha=0,96$	0,06	0,89	0,91	0,03	0,12
$\alpha=0,95$	0,06	0,88	0,91	-0,03	0,10
$\alpha=0,94$	0,07	0,87	0,91	-0,08	0,07
$\alpha=0,93$	0,09	0,86	0,91	-0,14	0,05
$\alpha=0,92$	0,11	0,85	0,87	-0,19	0,02
$\alpha=0,91$	0,18	0,79	0,74	-0,29	-0,01
$\alpha=0,90$	0,16	0,83	0,83	-0,30	-0,04
Gaussiano	0,57	0,80	0,39	0,58	0,50
S-M (2006)	0,36	0,84	0,78	0,44	0,50

Fonte: Própria

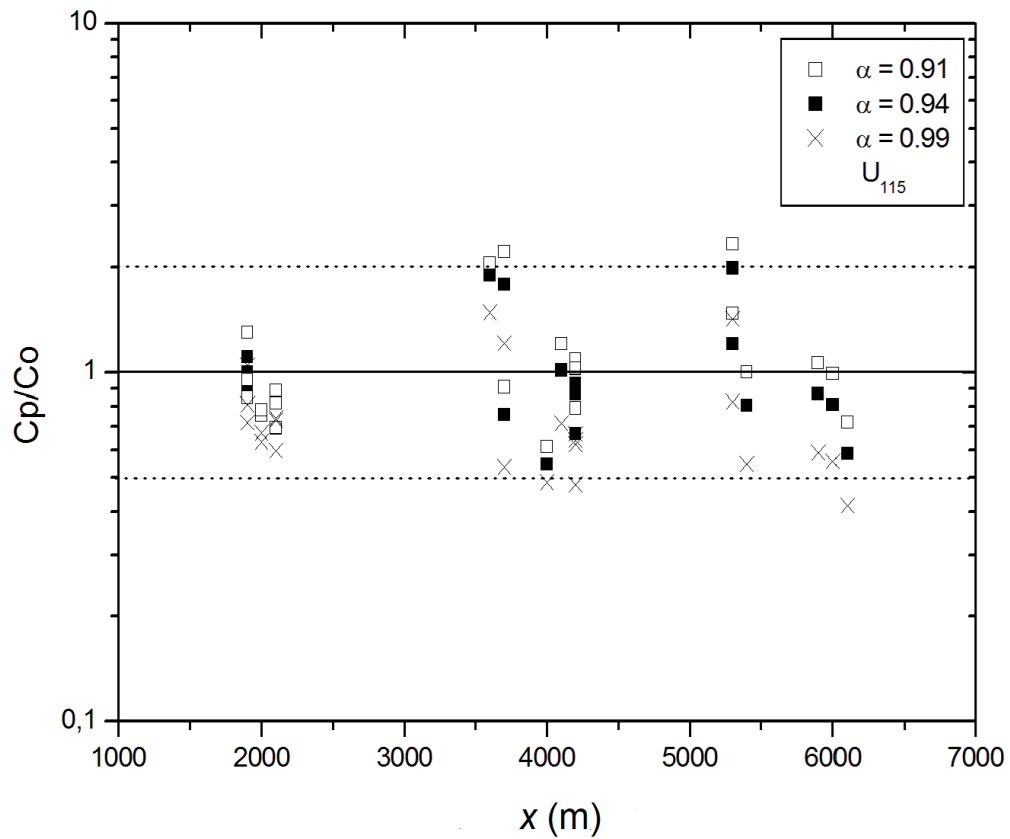
A Tabela 4.3 mostra que os melhores resultados ocorrem com $\alpha = 0,98$, apresentando o menor NMSE (0,08) e o maior FAT2 (100%). Os resultados são muito semelhantes para $\alpha = 0,99$ e $\alpha = 1,00$, mas para $\alpha = 0,98$, os valores de FB e FS também são mais baixos. No entanto, os resultados para todos os diferentes valores de α são melhores que os resultados dos modelos Gaussiano e S-M. Além da análise estatística, são apresentadas algumas figuras para uma melhor visualização dos resultados.

A avaliação diagnóstica mostra gráficos que comparam os resíduos, os quais são a diferença ou a razão entre as concentrações observadas e previstas, para considerar a variação em um parâmetro do modelo. Se houver uma tendência no gráfico, isso pode indicar um erro na física do modelo. O diagrama de dispersão entre as razões das concentrações previstas e as observadas é mostrado na figura 4.3, que considera simulações com a velocidade do vento na altura de 115 m. A linha ao meio é um para um, e as linhas laterais representam um fator de dois.

Figura 4.3: A razão entre C_p e C_0 em função de C_0 

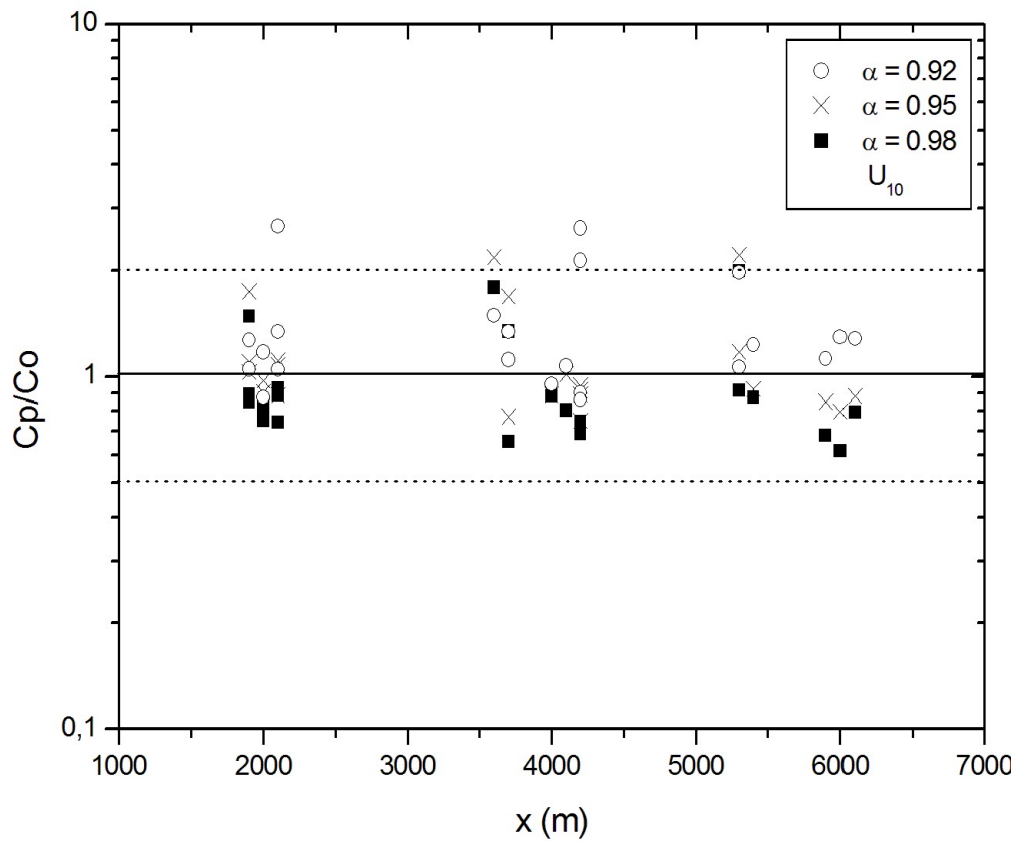
A Figura 4.3 e a Tabela 4.2 mostram que o presente modelo prevê 100% dos casos em um fator de dois usando $\alpha = 0,94$, enquanto 87% dos casos são previstos usando $\alpha = 0,91$ e $\alpha = 0,99$.

A Figura 4.4 mostra o gráfico residual em função da distância da fonte considerando simulações com velocidade do vento em 115 m . É evidente que há uma tendência em superestimar para $\alpha = 0,91$ e subestimar para $\alpha = 0,99$. A linha do meio é um para um e as linhas externas representam um fator de dois.

Figura 4.4: Gráfico residual (C_p/C_o) da concentração em função da distância da fonte

O gráfico de dispersão entre as razões das concentrações previstas e observadas em função das concentrações observadas é mostrado na Figura 4.5, considerando simulações com velocidade do vento em 10 m. A linha do meio é um para um, e as linhas externas representam um fator de dois.

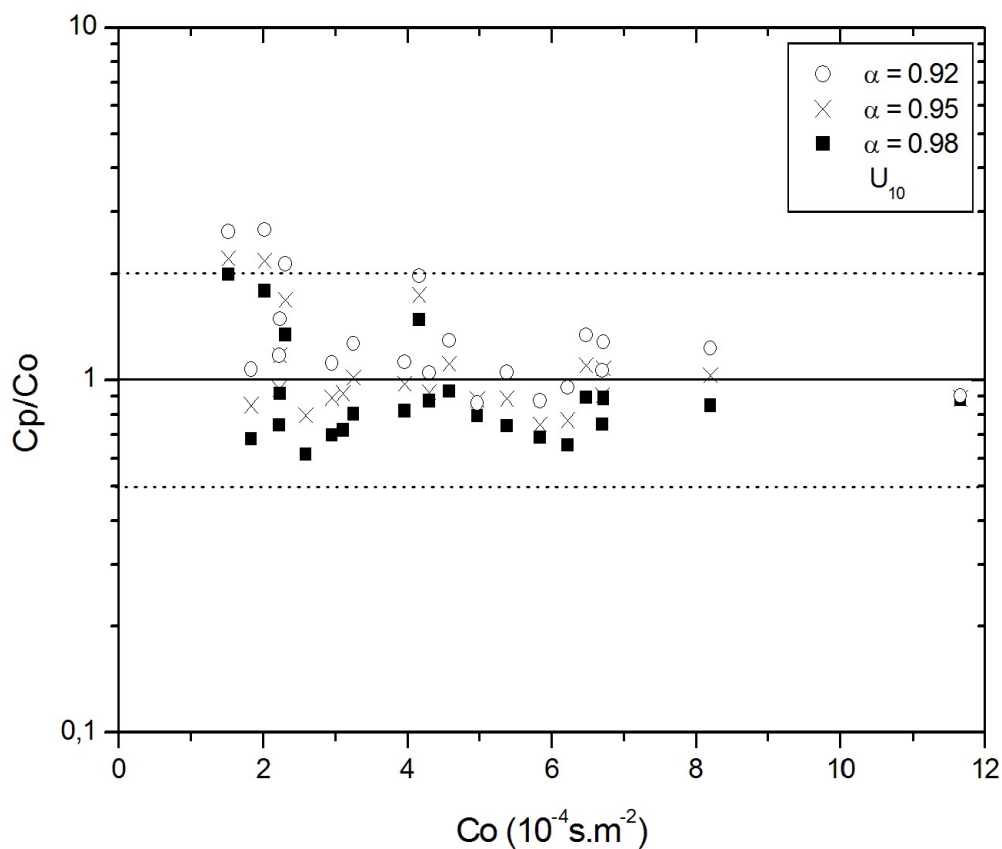
Figura 4.5: A razão entre C_p e C_0 em função de C_0



Fonte: Própria

O melhor resultado é representado com $\alpha = 0,98$, onde todos os pontos estão entre as linhas que representam o FAT2, considerando as simulações com uma velocidade do vento em 10 m.

A Figura 4.6 representa o gráfico residual das concentrações previstas função das concentrações observadas em função da distância da fonte, considerando simulações com velocidade do vento em 10 m. A linha do meio é um para um, e já as linhas externas representam um fator de dois.

Figura 4.6: Gráfico residual (C_p/C_o) da concentração em função da distância da fonte

Fonte: Própria

Observando-se os resultados da análise estatística e das figuras, é importante mencionar que as diferenças entre os dados experimentais não dependem somente da solução da equação de difusão-advecção, mas da própria equação, que é apenas um modelo da realidade. Deve-se considerar que, ao usar modelos, embora sejam instrumentos bastante sofisticados que refletem o estado atual do conhecimento sobre transporte turbulento na atmosfera, os resultados que eles fornecem estão sujeitos a uma considerável margem de erro. Isso ocorre devido a vários fatores, incluindo a incerteza da variabilidade intrínseca da atmosfera. Essa é uma característica geral da teoria da turbulência atmosférica e é uma consequência da abordagem estatística usada na tentativa de parametrizar, o caráter caótico dos dados medidos.

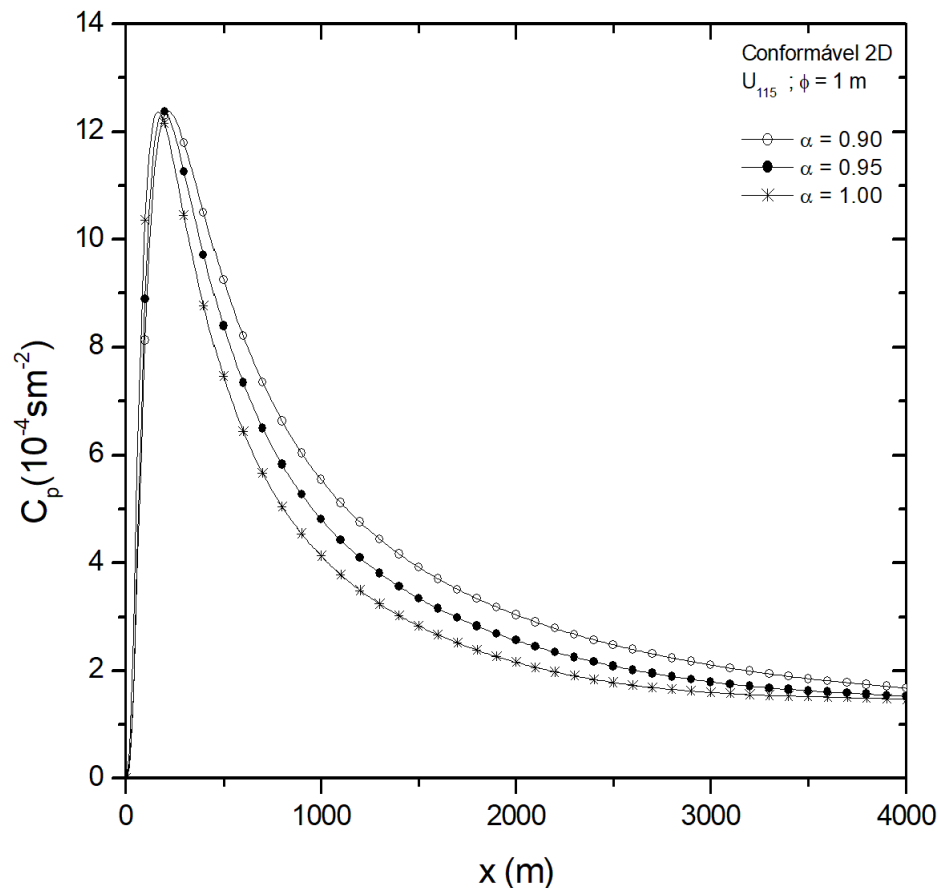
4.2.2 Derivada Conformável

Para analisar o problema da dimensionalidade foram utilizadas diferentes escalas de comprimento: $\phi = 10^{-3}$ m e $\phi = 1$ m. O caso em que $\phi = 10^{-3}$ m, representa a microescala de comprimento de *Kolmogorov* (η). Devido à derivada fractal que surge com o emprego da derivada conformável está hipótese surge como uma boa alternativa.

Como é conhecido que os movimentos turbulentos envolvem uma gama de escalas; de uma macroescala, na qual a energia é fornecida aos vórtices, a uma microescala de *Kolmogorov*, na qual a energia é dissipada pela viscosidade. Na CLP a microescala de *Kolmogorov* é aproximadamente $\eta = 10^{-3}$ m, Colin *et al.* (2017).

A primeira análise da solução dada pela (Equação (3.87)) é a verificação da influência do parâmetro α , o qual está intimamente relacionado ao termo advectivo que representa o transporte de massa devido ao vento médio longitudinal. Nesse sentido, a Figura 4.7 mostra a concentração em função da distância da fonte para diferentes ordens fracionárias da derivada: α (0,90; 0,95 e 1,00), utilizando o experimento 1 dos dados de Copenhagen com vento de 115 m.

Figura 4.7: Concentração integrada lateralmente ao nível do solo em função da distância da fonte, considerando diferentes parâmetros fracionários



Fonte: Própria

Neste caso, observa-se que a solução com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte não altera (sensivelmente) a posição do pico de concentração. Além disso, está claro que o parâmetro α influencia o processo de dispersão para maiores distâncias da fonte. Para os diferentes valores de α observou-se uma sensível concentração mais alta de poluentes na região próxima à fonte.

A próxima análise é uma avaliação estatística das simulações do modelo para verificar qual valor de α apresenta os melhores resultados. A Tabela 4.4 mostra alguns desempenhos dos resultados do modelo considerando-se a velocidade do vento medido em 115 m.

Tabela 4.4: Indicadores estatísticos de desempenho do modelo para diferentes valores de α com velocidade do vento U_{115}

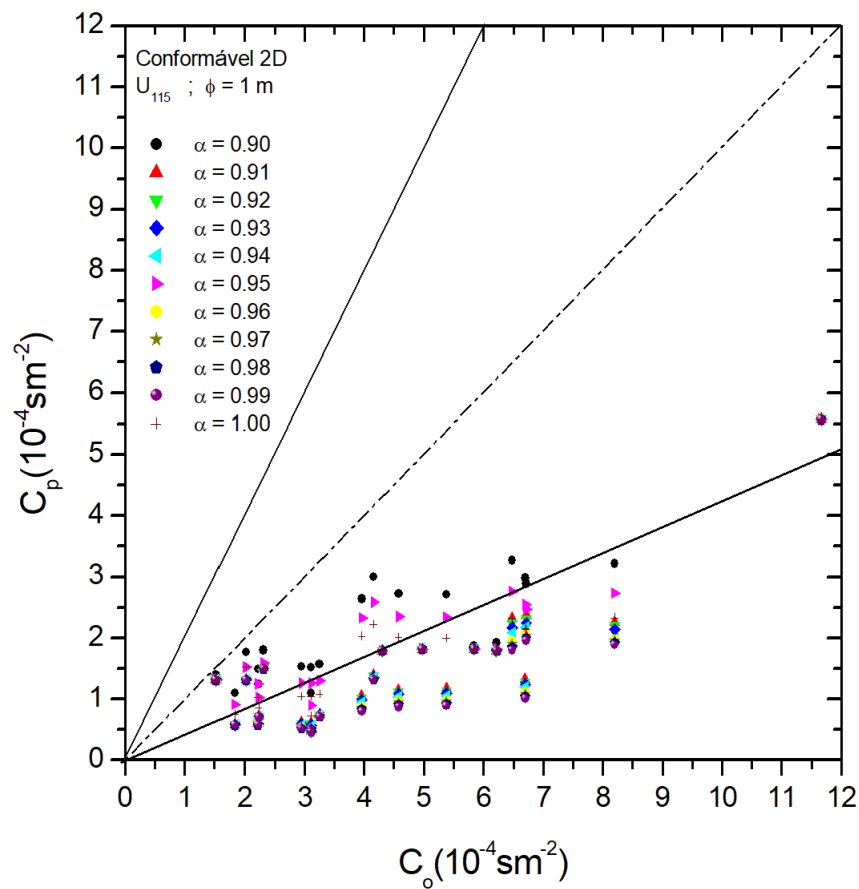
Modelo	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
$\alpha=0,90$	0,78	0,87	0,52	0,68	0,82
$\alpha=0,91$	1,73	0,85	0,13	1,00	0,78
$\alpha=0,92$	1,77	0,84	0,13	1,01	0,78
$\alpha=0,93$	1,82	0,83	0,13	1,02	0,76
$\alpha=0,94$	1,88	0,82	0,13	1,03	0,78
$\alpha=0,95$	1,01	0,88	0,30	0,78	0,84
$\alpha=0,96$	1,05	0,81	0,13	1,04	0,78
$\alpha=0,97$	1,98	0,80	0,13	1,05	0,78
$\alpha=0,98$	2,02	0,79	0,13	1,06	0,78
$\alpha=0,99$	2,06	0,79	0,13	1,06	0,78
$\alpha=1,00$	1,26	0,87	0,21	0,87	0,85

Fonte: Própria

A tabela 4.4 indica que o melhor resultado ocorre para $\alpha = 0,90$, com menor NMSE (0,78) e FAT2 de 52% (0,52). Segundo Chang & Hanna (2004), não é possível obter-se modelos absolutamente perfeitos, utilizam-se como critérios para desempenhos satisfatórios: FAT2 50%; $-0,3 < FB < 0,3$ e $NMSE \leq 0,5$.

O diagrama de dispersão representando as razões das concentrações previstas e observadas é apresentada na Figura 4.8, que considera simulações com velocidade do vento na altura de 115 m, $\phi = 1$ m.

Figura 4.8: Espalhamento da concentração de poluentes usando U_{115} e $\phi = 1$ m e diferentes valores de α

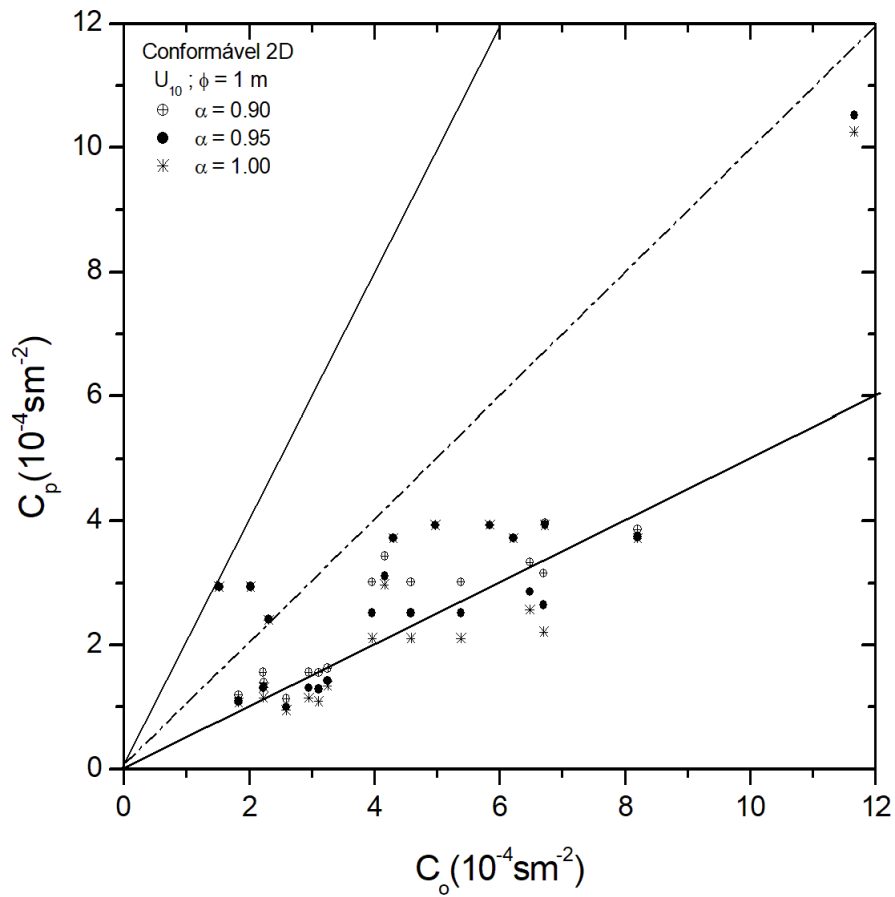


Fonte: Própria

Observa-se através da Figura 4.8 e da Tabela 4.4 que os resultados não são bons utilizando o vento medido em 115 m, considerando-se as mudanças do parâmetro fracionário. O modelo prediz 52% dos casos em um fator de dois usando $\alpha = 0,90$.

O diagrama de dispersão entre as razões das concentrações previstas e as observadas é mostrada na Figura 4.9 a seguir: que considera simulações com velocidade do vento na altura de 10 m. Os pontos entre as linhas pontilhadas correspondem a $(C_p/C_o \in [0.5, 2])$.

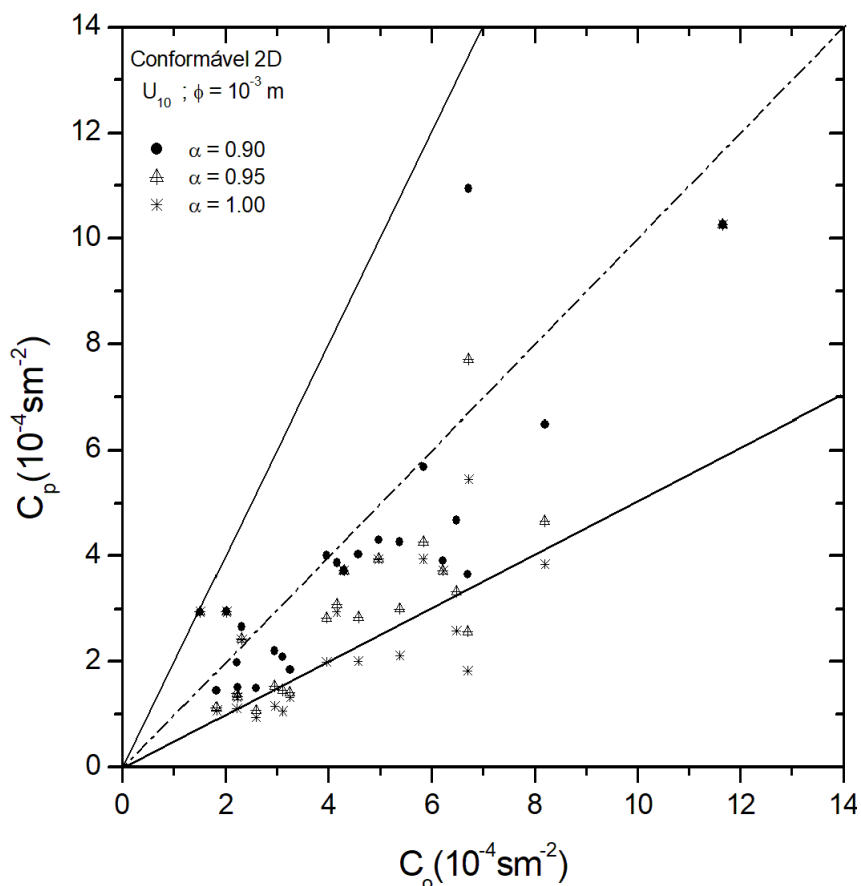
Figura 4.9: Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α



Fonte: Própria

Em seguida na Figura 4.10 é mostrado diagrama de dispersão entre as razões das concentrações previstas e as observadas, que considera simulações com velocidade do vento na altura de 10 m e diferentes valores de α , utilizando $\phi = 10^{-3}$ m que representa a microescala de comprimento de *Kolmogorov* (η).

Figura 4.10: Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 10^{-3}$ m e diferentes valores de α



Fonte: Própria

Obseva-se prontamente que os melhores resultados ocorrem para $\alpha = 0,90$, velocidade do vento medida em 10 m e a escala de comprimento de *Kolmogorov* ($\phi = 10^{-3}$). Este é um resultado bastante interessante, pois esta escala de comprimento representa a menor escala fractal em termos atmosféricos. Observa-se que o FAT2 é 100%, o que representa que todos os pontos estão entre as linhas contínuas.

4.3 Simulações Tridimensionais

Os parâmetros meteorológicos para este experimento com dados tridimensionais de concentração são apresentados na Tabela 4.5. Observe que, neste experimento, a concentração na linha central foi normalizada pela taxa de emissão (c/Q). Como anteriormente, o parâmetro U_{10} representa a velocidade do vento medida em 10 m, e o parâmetro U_{115} representa a velocidade do vento medida na altura de 115 m.

Tabela 4.5: Parâmetros meteorológicos durante o experimento de Copenhagen.

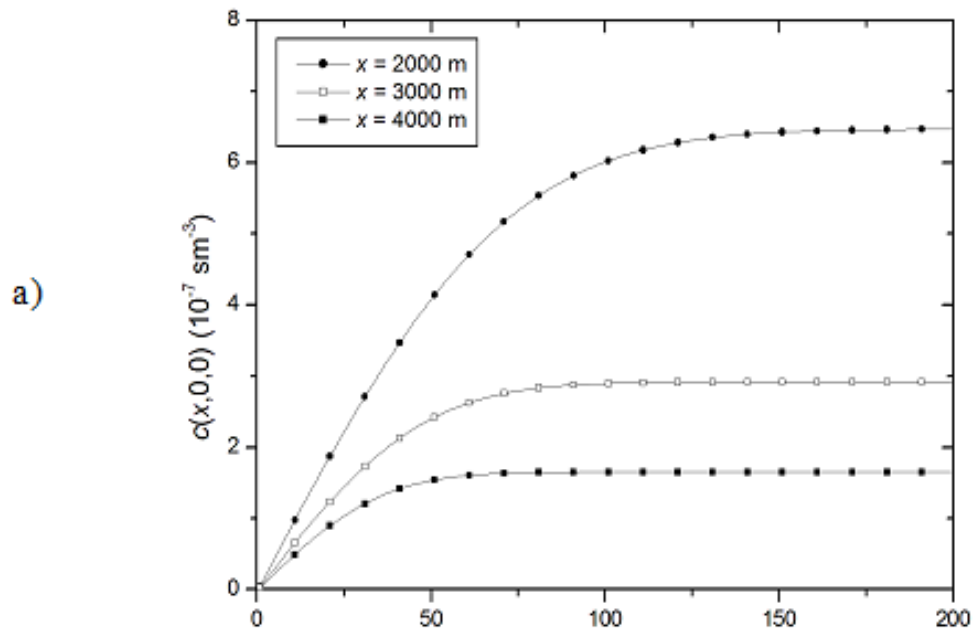
Exp	$U_{10}(ms^{-1})$	$U_{115}(ms^{-1})$	$h (m)$	$\sigma_v(ms^{-1})$	$\sigma_w(ms^{-1})$	$x (m)$	$c(x, 0, 0)/Q(10^{-7} sm^{-3})$
1	2,1	3,4	1980	0,98	0,83	1900	10,50
						3700	2,14
2	4,9	10,6	1920	1,39	1,07	2100	9,85
						4200	2,83
3	2,4	5,0	1120	0,85	0,68	1900	16,33
						3700	7,95
						5400	3,76
4	2,5	4,6	390	0,47	0,47	4000	15,71
5	3,1	6,7	820	0,77	0,71	2100	12,11
						4200	7,24
						5100	4,75
6	7,2	13,2	1300	2,26	1,33	2000	7,44
						4200	3,37
						5900	1,74
7	4,1	7,6	1850	1,61	0,87	2000	9,48
						4100	2,62
						5300	1,15
8	4,2	9,4	810	1,35	0,72	1900	9,76
						3600	2,64
						5300	0,98
9	5,1	10,5	2090	1,71	0,98	2100	8,52
						4200	2,66
						6000	1,98

Fonte: Própria

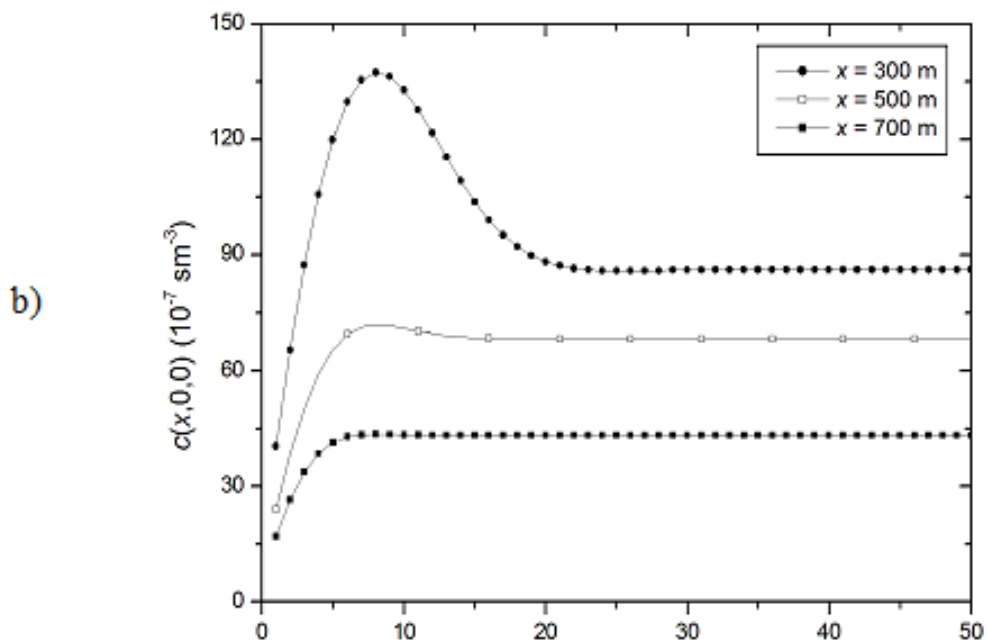
4.3.1 Derivada Fracionária de Caputo

A Figura 4.11 mostra a convergência numérica da solução tridimensional proposta pela (Equação (3.76)) para a concentração ao nível do solo, para as distâncias de 2000, 3000 e 4000 m, em função do número de autovalores i (solução GITT) e a distâncias de 300, 500, e 700 m em função do número de termos n (solução LDM) para a velocidade do vento U_{115} (medida na altura da fonte) com $\alpha = 1,00$.

Figura 4.11: Teste de convergência do modelo: (a) concentração em função do número de autovalores i (GIT); (b) concentração em função do número de termos na série n (LDM)



(a) Número de autovalores



(b) Número de termos

Fonte: Própria

A Figura 4.11 mostra a convergência para ambas as séries, onde a convergência mais rápida das séries é obtida usando o método LDM.

Da mesma forma que foi realizada com a solução bidimensional, uma avaliação estatística das simulações comparadas com os dados experimentais tridimensionais de Copenhagen foi efetuada para avaliar a influência do parâmetro α , além de comparar os resultados do modelo com os resultados obtidos de outros modelos descritos na literatura.

A Tabela 4.6 mostra os valores obtidos para os índices estatísticos usados anteriormente, usando o modelo fornecido pela (Equação (3.76)) para vários valores de α e velocidades do vento médio em alturas de 10 e 115 m. Os resultados obtidos usando outros modelos são mostrados para comparação. O modelo 2 é a técnica GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*) com coeficientes de difusão dependentes de variáveis x e z (turbulência não homogênea na direção vertical), mas usando uma média na direção longitudinal Costa *et al.* (2006), e uma velocidade do vento com um perfil de similaridade. O modelo 3 é a técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) Moreira & Vilhena (2009), também com coeficiente de difusão que depende da direção vertical z .

Tabela 4.6: Avaliação estatística dos modelos.

Modelo de Dispersão		NMSE	COR	FAT2	FB	FS
Modelo 1 U_{115}	$\alpha = 1,00$	0,14	0,90	0,78	0,18	0,04
	$\alpha = 0,99$	0,11	0,91	0,96	0,04	-0,07
	$\alpha = 0,98$	0,13	0,91	0,91	-0,09	-0,17
	$\alpha = 0,97$	0,19	0,91	0,91	-0,22	-0,30
	$\alpha = 0,96$	0,29	0,91	0,82	-0,34	-0,38
Modelo 1 U_{10}	$\alpha = 1,00$	0,71	0,93	0,30	0,65	0,49
	$\alpha = 0,99$	0,46	0,93	0,57	0,52	0,38
	$\alpha = 0,98$	0,27	0,93	0,83	0,39	0,26
	$\alpha = 0,97$	0,15	0,94	0,83	0,26	0,14
	$\alpha = 0,96$	0,09	0,94	0,87	0,13	0,01
	$\alpha = \mathbf{0,95}$	0,08	0,94	0,96	-0,01	-0,11
Modelo 2 (U similaridade)	GIADMT (Costa et al., 2006)	0,15	0,87	0,96	0,01	-0,09
Modelo 3 (U lei de potência)	GILTT (Moreira et al., 2009)	0,33	0,80	0,87	0,28	0,09

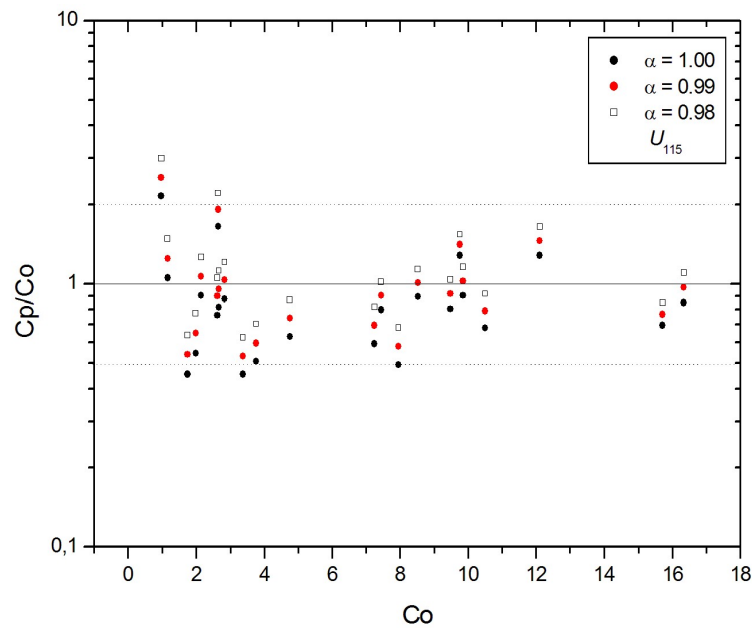
Fonte: Própria

A Tabela 4.6 mostra que o modelo proposto neste trabalho (*Modelo 1*) apresenta os melhores resultados, em relação aos demais modelos considerados, para $\alpha = 0,95$ e uma velocidade do vento em 10 m. Para esses valores, o *Modelo 1* produz o NMSE mais baixo (0,08) e o FAT2 mais alto (0,96). Os piores resultados são obtidos para $\alpha = 1,00$ e uma velocidade do vento em 10 m, que representa a derivada de ordem inteira, pois possui o NMSE mais alto (0,71) e o FAT2 mais baixo (0,30). Observa-se que

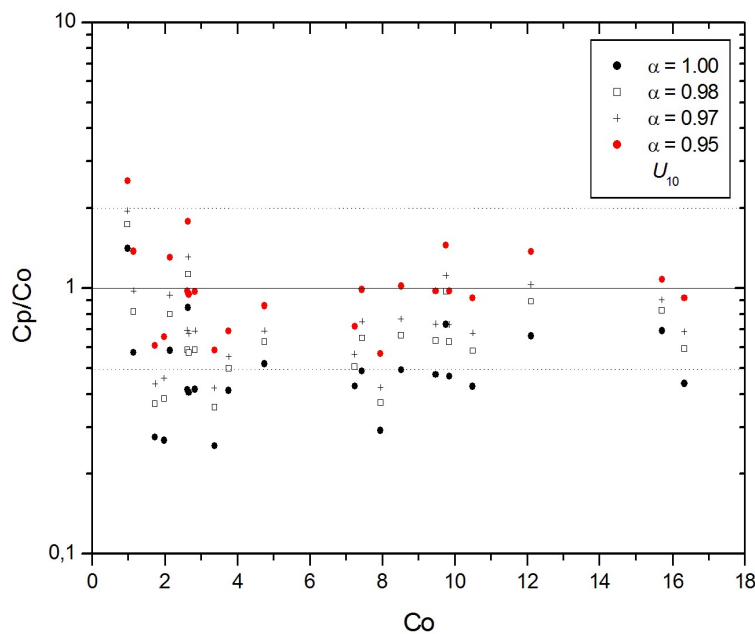
o fato de os parâmetros físicos não dependerem explicitamente da variável z , que é a mais influenciada pela superfície da Terra, não afeta negativamente os resultados da solução proposta, porque a variação em α compensa de alguma forma a falta de turbulência não homogênea na direção vertical. Isso pode ser confirmado comparando-se os resultados obtidos com o modelo proposto neste trabalho (Modelo 1) e os resultados dos Modelos 2 e 3 (GIADMT e GILTT, respectivamente), que consideram a não homogeneidade na direção vertical, sendo que os modelos são mais complexos com respeito à sua solução e implementação computacional. O modelo proposto neste trabalho é mais simples e mais fácil de implementar, e sua natureza analítica permite uma análise explícita dos parâmetros físicos.

Além dos resultados da análise estatística, algumas figuras também foram geradas para ilustrar os resultados. Na Figura 4.12 são mostrados os gráficos das razões entre as concentrações previstas pelo modelo e as observadas, (C_p/C_o) , para simulações usando as velocidades de ventos medidos em 10 m e 115 m.

Figura 4.12: Razão entre a concentração prevista (C_p) e a observada (C_o) ao nível do solo: a) velocidade do vento a 115 m; b) velocidade do vento a 10 m



(a) velocidade do vento a 115 m



(b) velocidade do vento a 10 m

Fonte: Própria

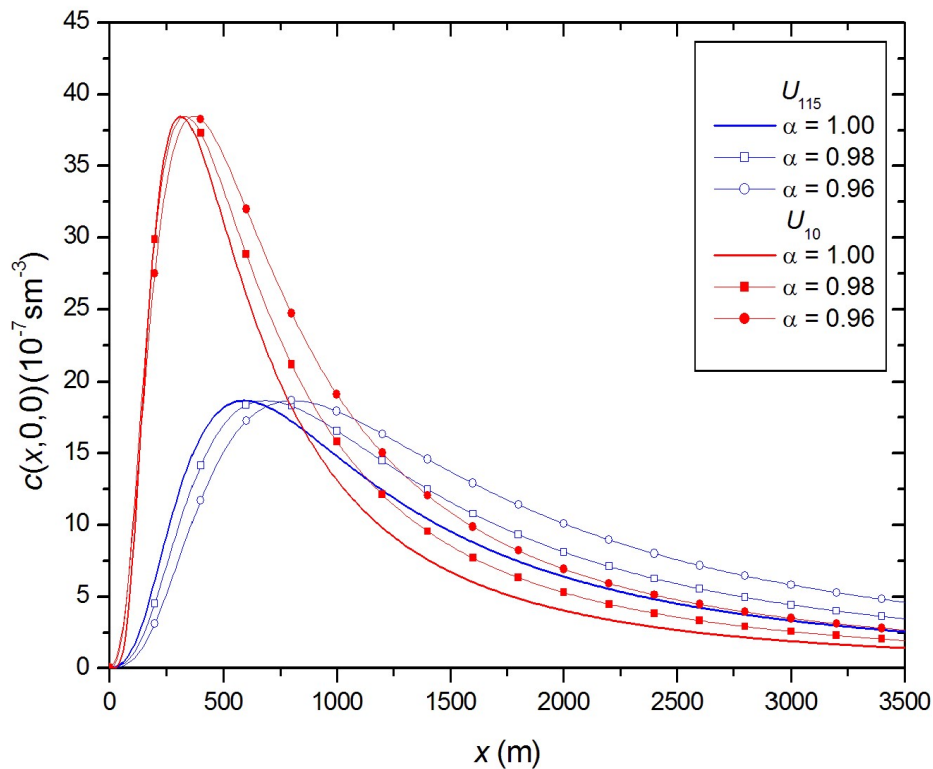
A Figura 4.13 mostra que a concentração modelada obtida ao nível do solo, sob as condições moderadamente instáveis do experimento de Copenhagen, é melhor representado por $\alpha = 0,99$, usando a velocidade do vento U_{115} , e $\alpha = 0,95$, para a velocidade do vento U_{10} . Praticamente todos os pontos de dados estão entre as linhas pontilhadas, representando um fator de dois ($FAT2 = 0,96$). As simulações para o caso da veloci-

dade do vento U_{10} tiveram os resultados mais fracos com o parâmetro de ordem inteira ($\alpha = 1,00$).

Como mostram a Figura 4.12 e a Tabela 4.6, os melhores resultados foram obtidos para $\alpha = 0,95$ (NMSE = 0,08 e COR = 0,94) e velocidade do vento U_{10} , mas os resultados foram igualmente bons para $\alpha = 0,99$ (NMSE = 0,11 e COR = 0,91) e velocidade do vento U_{115} . Nesse caso, é evidente que o efeito de memória que foi considerado no coeficiente de difusão é dependente tanto da distância da fonte quanto da ordem da derivada fracionária.

A Figura 4.13 mostra como a concentração de poluentes simulada usando a (Equação (3.76)) varia em função da distância da fonte para diferentes valores do parâmetro fracionário α .

Figura 4.13: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte, considerando a velocidade do vento medida em 10 m (linhas vermelhas) e 115 m (linhas azuis), para diferentes parâmetros fracionários: $\alpha = 1,00$, $\alpha = 0,98$ e $\alpha = 0,96$ (experimento de Copenhagen).



Fonte: Própria

Observa-se que a solução adotada altera a posição do pico de concentração, mas não altera seu valor máximo. Além disso, claramente o parâmetro α influencia o processo de dispersão. Para a simulação de ordem inteira ($\alpha = 1,00$), é observada uma concentração mais alta de poluentes na região próxima à fonte, com uma tendência para a concentração diminuir mais rapidamente com o aumento da distância da fonte. À medida que diminui o parâmetro α , nota-se que o pico de concentração muda de posição,

tendendo a diminuir mais lentamente para distâncias maiores.

As simulações realizadas com a velocidade do vento U_{10} , para todos os parâmetros fracionários, exibem um pico de concentração mais alto para regiões mais perto da fonte. A velocidade do vento U_{115} no modelo mudou o pico em maiores distâncias e praticamente reduziu pela metade o pico de concentração em relação à velocidade do vento U_{10} para os dados do experimento 9 de Copenhagen. É importante notar que os experimentos de Copenhagen envolveram medições de concentração em distâncias de aproximadamente 2 a 6 km, um alcance dentro do qual há uma grande similaridade no comportamento das curvas para esse intervalo, mas com diferenças consideráveis em termos de valores de concentração. Por exemplo, os resultados das simulações obtidos para a velocidade do vento em 115 m e $\alpha = 1,00$, são praticamente coincidentes com os da velocidade do vento em 10 m e $\alpha = 0,96$. Além disso, há uma tendência para a concentração diminuir com o aumento da distância e com uma aproximação das curvas durante o processo de dispersão.

4.3.2 *Derivada Conformável*

A análise é dada pela solução da (Equação (3.95)) utilizando o experimento 1 de Copenhagen, conforme mostrado na Tabela 4.5 e utilizado na simulação tridimensional fracionária. A Tabela 4.7 mostra os valores obtidos para os índices estatísticos usados anteriormente, usando o modelo para vários valores de α e velocidades do vento médio em alturas de 10 e 115 m.

Tabela 4.7: Avaliação estatística dos modelos com derivada conformável.

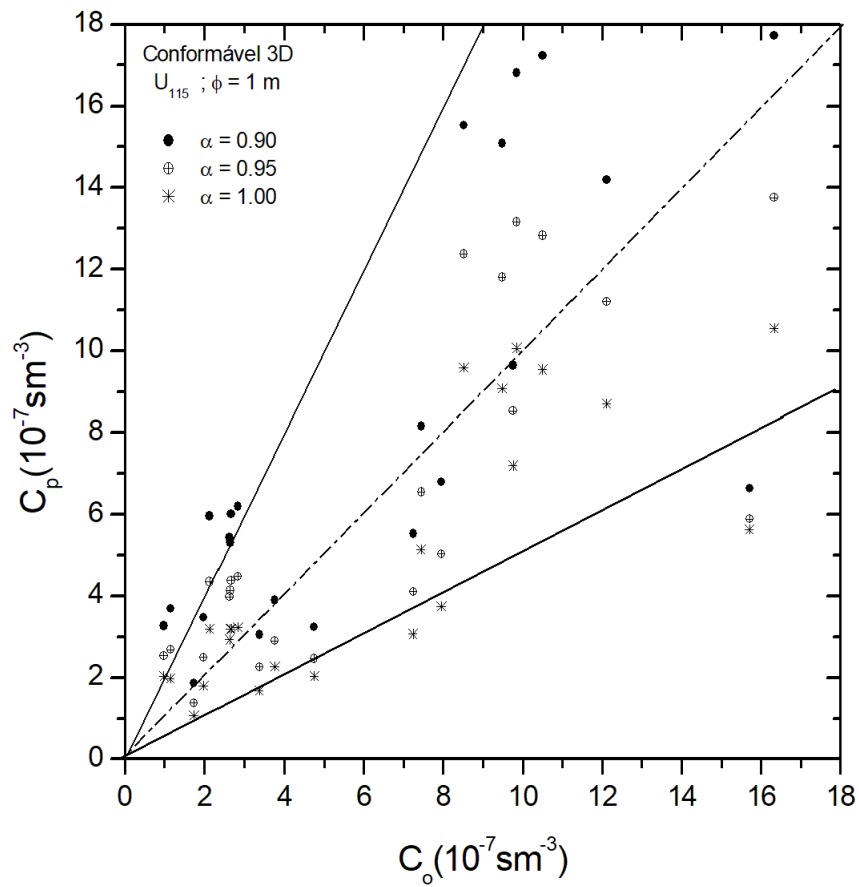
$\phi = 10^{-3}$ m	Modelo de Dispersão	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
U_{115}	$\alpha = 1,00$	1,30	0,63	0,52	0,73	0,73
	$\alpha = 0,95$	1,49	0,22	0,56	-0,78	-1,56
	$\alpha = 0,90$	1,98	0,45	0,26	-0,89	-0,88
U_{10}	$\alpha = 1,00$	0,41	0,92	0,83	0,40	0,63
	$\alpha = \mathbf{0,95}$	0,12	0,87	0,91	-0,02	0,14
	$\alpha = 0,90$	0,64	0,78	0,48	-0,53	-0,48
$\phi = 1$ m	Modelo de Dispersão	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
U_{115}	$\alpha = 1,00$	0,30	0,82	0,74	0,27	0,36
	$\alpha = 0,95$	0,21	0,78	0,83	0,01	0,11
	$\alpha = 0,90$	0,29	0,75	0,65	-0,24	-0,13
U_{10}	$\alpha = 1,00$	0,41	0,92	0,83	0,40	0,63
	$\alpha = \mathbf{0,95}$	0,19	0,91	0,96	0,20	0,42
	$\alpha = 0,90$	0,12	0,87	0,87	-0,03	0,15

Fonte: Própria

A Tabela 4.7 apresenta os melhores resultados do modelo, utilizando a derivada conformável com o vento U_{10} , com $\alpha = 0,95$ e $\phi = 10^{-3}$ m, Sendo o NMSE mais baixo NMSE (0,12) e o FAT2 (0,91). De forma semelhante em U_{10} , com $\phi = 1$ m e $\alpha = 0,95$, o mais alto FAT2 (0,96).

A Figura 4.14 mostra o gráfico de espalhamento usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α considerando velocidade do vento medido em 115 m.

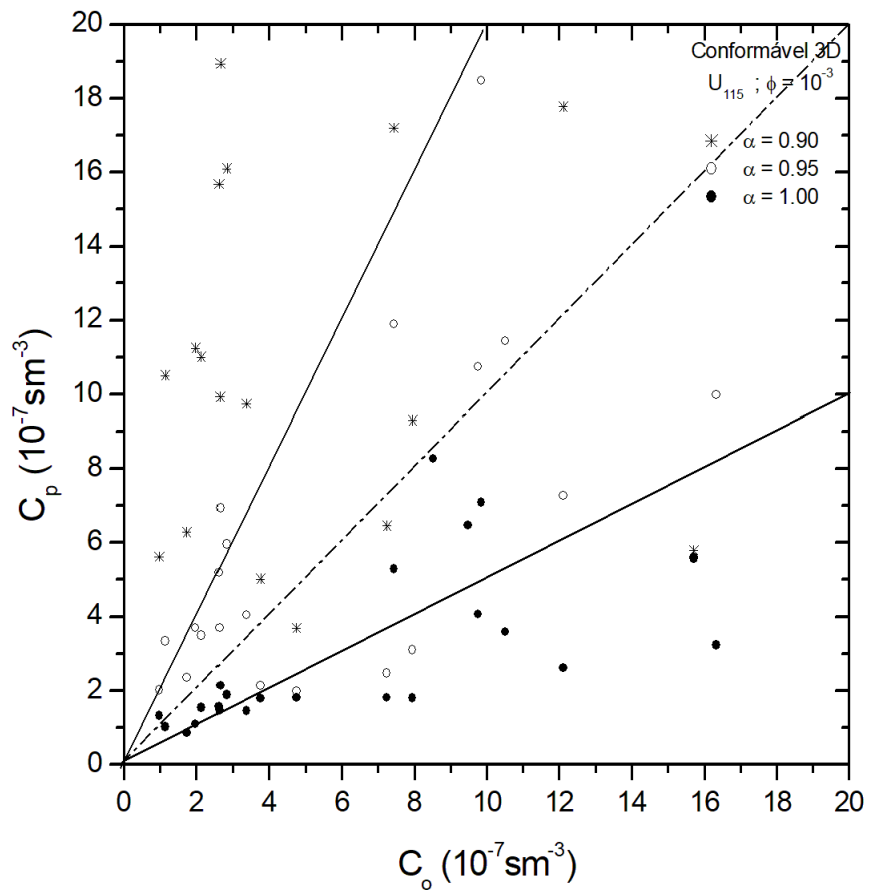
Figura 4.14: Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α



Fonte: Própria

A Figura 4.15 mostra o gráfico de espalhamento usando $\phi = 10^{-3}$ m e diferentes valores de α , considerando velocidade do vento medido em 115 m.

Figura 4.15: Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 10^{-3}$ m e diferentes valores de α

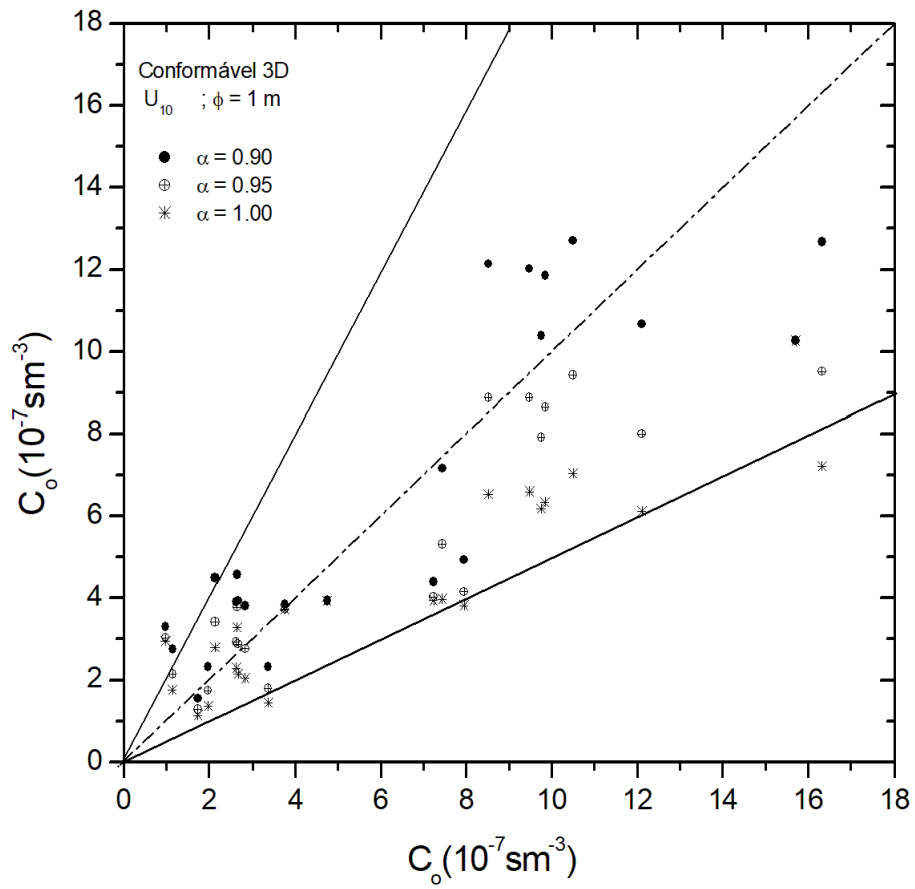


Fonte: Própria

Observa-se nas Figuras 4.14 e 4.15 um grande espalhamento quando considerado vento em 115 m para o caso $\phi = 10^{-3}$ m, e menor espalhamento para $\phi = 1$ m.

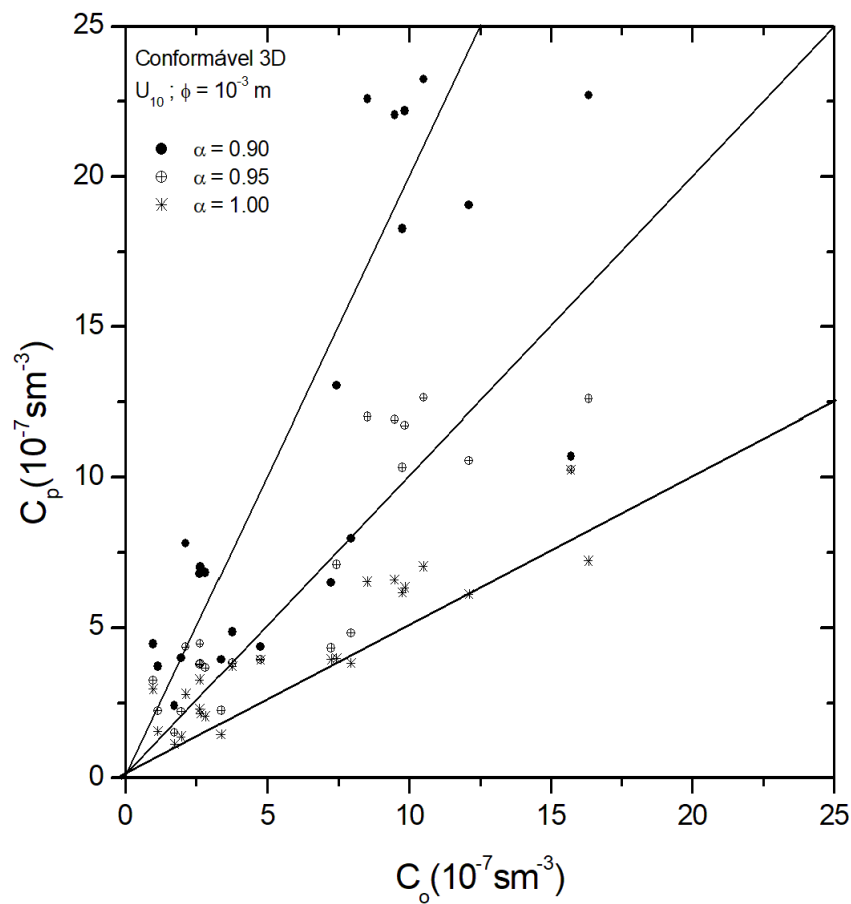
A Figura 4.16 mostra o gráfico de espalhamento usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α , considerando velocidade do vento medio em 10 m.

Figura 4.16: Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 1$ m e diferentes valores de α



Fonte: Própria

Figura 4.17: Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = 10^{-3}$ m e diferentes valores de α



Fonte: Própria

O diagrama de dispersão entre as razões das concentrações previstas e as observadas é mostrada nas Figura 4.16 e 4.17 um menor espalhamento quando considerado vento em 10 m para ambos valores de ϕ .

De certa forma, tanto os resultados usando a derivada de Caputo como os da derivada conformável são similares. No entanto, no caso das derivadas de Caputo forma considerados somente a simulação em que $\phi = 1$ m. Diferentemente, para o caso das derivadas conformáveis 2D e 3D foi acrescida a microescala de Kolmogorov, apresentando também bons resultados. No caso 2D a diferença entre ϕ igual a 2m e $\phi = 10^{-3}$ m foi mais acentuada.

Considerações Finais

Este estudo ressaltou a importância para uma nova direção em problemas de dispersão de poluentes atmosféricos usando equações diferenciais fracionárias. É importante frisar que o cálculo fracionário é a generalização do cálculo tradicional de ordem inteira. Neste sentido, o trabalho teve como objetivo principal a obtenção de uma nova metodologia de solução da equação difusão-advecção com o propósito de simular a dispersão de poluentes emitidos na CLP.

Normalmente, equações diferenciais permitem soluções com ordens inteiras em suas derivadas. No entanto, em derivadas fracionárias, essa ordem pode ser alterada para números não inteiros. A metodologia proposta, juntamente com o conceito de derivadas fracionárias, resultou em soluções analíticas da equação de difusão-advecção linear de maneira mais simples e mais geral, sugerindo que ela pode ser estendida a problemas não lineares. Este procedimento foi utilizado pela primeira vez na simulação da dispersão atmosférica de poluentes.

O fato de os parâmetros físicos do modelo (coeficientes de difusão e velocidade do vento) não dependerem explicitamente da variável z , que é mais influenciado pela superfície da Terra, não afetou negativamente os resultados porque a variação no parâmetro α (efeito de memória) compensa de alguma forma essa falta de homogeneidade da turbulência na direção vertical. Isto é confirmado com a comparação entre o modelo proposto e os resultados obtidos pelos modelos GIADMT e GILTT, os quais consideram a falta de homogeneidade na direção vertical e, que além disso, são modelos mais complexos. Diferentemente, o modelo proposto aqui é mais simples, fácil de implementar e permite uma análise explícita dos parâmetros físicos em virtude de sua natureza analítica. Os resultados sugerem que não há vantagem em usar um coeficiente de difusão que é dependente das variáveis x e z no processo de dispersão, dada as condições meteorológicas dos experimentos de Copenhagen.

Além dos bons resultados com as soluções utilizando a derivada de Caputo, as simulações utilizando a derivada conformável também apresentaram resultados adequados, particularmente com vento medido em 10 m. A grande vantagem da derivada conformável é que transforma um problema fracionário em um problema de derivada de ordem inteira. No entanto, com este procedimento perde-se o efeito de memória intrínseco as derivadas fracionárias. Importante salientar também a correção da dimensão da equação a ser resolvida com a introdução do parâmetro ϕ . Este parâmetro ainda é algo a ser discutido em trabalhos futuros.

Referências Bibliográficas

ACIOLI, Palmira Santana; XAVIER, Frederico Andrade; MOREIRA, Davidson Martins. Mathematical model using fractional derivatives applied to the dispersion of pollutants in the planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 170, n. 2, p. 285–304, 2019.

ADOMIAN, G. Solving frontier problems of physics: the decomposition method, with a preface by yves cherruault. *Fundamental Theories of Physics, Kluwer Academic Publishers Group, Dordrecht*, v. 1, 1994.

ARYA, S Pal. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, v. 34, n. 5, p. 1112–1122, 1995.

ATHAYDE, Alexandre Sacco de. Solução analítica das equações acopladas de advecção-difusão e navier-stokes para simulação da emissão de poluentes. 2019.

BENSON, David A; MEERSCHAERT, Mark M; REVIELLE, Jordan. Fractional calculus in hydrologic modeling: A numerical perspective. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 51, p. 479–497, 2013.

BERRYMAN, James G. Evolution of a stable profile for a class of nonlinear diffusion equations with fixed boundaries. *Journal of mathematical physics*, American Institute of Physics, v. 18, n. 11, p. 2108–2115, 1977.

BERYLAND, MY. Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere. *Gidrometezdat, Leningrad, translated into English by NERC, US EPA*, 1975.

BREBBIA, Carlos A; BREBBIA, Carlos A. *Progress in Boundary Element Methods: Pentech press London*. [S.l.]: Springer, 1981.

BUSKE, D *et al.* An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. *Environmental Fluid Mechanics*, Springer, v. 7, n. 1, p. 43–54, 2007a.

BUSKE, Daniela *et al.* Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 41, n. 26, p. 5496–5501, 2007b.

BYCHUK, Oleg V; O'SHAUGHNESSY, Ben. Anomalous diffusion at liquid surfaces. *Physical review letters*, APS, v. 74, n. 10, p. 1795, 1995.

CHANG, Joseph C; HANNA, Steven R. Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, Springer, v. 87, n. 1, p. 167–196, 2004.

CHEROTO, Silvia *et al.* Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms. *International journal of thermal sciences*, Elsevier, v. 38, n. 7, p. 613–621, 1999.

- CHOCK, David P; SUN, Pu; WINKLER, Sandra L. Trajectory-grid: An accurate sign-preserving advection-diffusion approach for air quality modeling. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 30, n. 6, p. 857–868, 1996.
- CHRYSIKOPOULOS, Constantinos V; HILDEMANN, Lynn M; ROBERTS, Paul V. A three-dimensional steady-state atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, Elsevier, v. 26, n. 5, p. 747–757, 1992.
- COLIN, Jeanne *et al.* Adaptation of the meteorological model meso-nh to laboratory experiments: implementations and validation. *Geoscientific Model Development Discussions*, Copernicus GmbH, p. 1–32, 2017.
- COSTA, CP *et al.* Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 40, n. 29, p. 5659–5669, 2006.
- COTTA, RM; UNGS, MJ; MIKHAILOV, MD. Contaminant transport in finite fractured porous medium: integral transforms and lumped-differential formulations. *Annals of Nuclear Energy*, Elsevier, v. 30, n. 3, p. 261–285, 2003.
- COTTA, Renato Machado. *Integral transforms in computational heat and fluid flow*. [S.l.]: CRC Press, 1993.
- COTTA, Renato Machado; MIKHAILOV, Mikhail D. *Heat conduction: lumped analysis, integral transforms, symbolic computation*. [S.l.]: Wiley Chichester, 1997.
- CRANK, John. *The mathematics of diffusion*. [S.l.]: Oxford university press, 1979.
- DEBNATH, Lokenath. Recent applications of fractional calculus to science and engineering. *International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences*, Hindawi, v. 2003, n. 54, p. 3413–3442, 2003.
- _____. *Transforms and their applications*. 2007.
- DEBNATH, Lokenath; BHATTA, Dambaru. *Integral transforms and their applications*. [S.l.]: CRC press, 2007.
- DEGRAZIA, Gervásio A; MOREIRA, Davidson M; VILHENA, Marco T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology*, v. 40, n. 7, p. 1233–1240, 2001.
- DEMUTH, Cl. A contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 12, n. 5, p. 1255–1258, 1978.
- DESERI, Luca; ZINGALES, Massimiliano. A mechanical picture of fractional-order darcy equation. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 20, n. 3, p. 940–949, 2015.
- DYKE, Milton Van. Perturbation methods in fluid mechanics/annotated edition. *NASA STI/Recon Technical Report A*, v. 75, p. 46926, 1975.
- ESSA, Khaled SM; ETMAN, Soad M; EMBABY, M. New analytical solution of the dispersion equation. *Atmospheric research*, Elsevier, v. 84, n. 4, p. 337–344, 2007.

- GARRAPPA, Roberto; KASLIK, Eva; POPOLIZIO, Marina. Evaluation of fractional integrals and derivatives of elementary functions: Overview and tutorial. *Mathematics*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 7, n. 5, p. 407, 2019.
- GHORBANI, Asghar. Toward a new analytical method for solving nonlinear fractional differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 197, n. 49-50, p. 4173–4179, 2008.
- GÓMEZ-AGUILAR, JF *et al.* Modeling and simulation of the fractional space-time diffusion equation. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 30, n. 1-3, p. 115–127, 2016.
- GORENFLO, Rudolf; MAINARDI, Francesco. Some recent advances in theory and simulation of fractional diffusion processes. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 229, n. 2, p. 400–415, 2009.
- GOULART, AGO *et al.* Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 477, p. 9–19, 2017.
- GRISOGONO, Branko; OERLEMANS, Johannes. Katabatic flow: Analytic solution for gradually varying eddy diffusivities. *Journal of the atmospheric sciences*, v. 58, n. 21, p. 3349–3354, 2001.
- GRYNING, Sven-Erik *et al.* Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 21, n. 1, p. 79–89, 1987.
- GRYNING, Sven-Erik; LYCK, Erik. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, v. 23, n. 4, p. 651–660, 1984.
- GUERRERO, JS Pérez *et al.* A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 55, p. 201–212, 2012.
- HANNA, Steven R. Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 23, n. 6, p. 1385–1398, 1989.
- HE, Ji-Huan. Homotopy perturbation technique. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 178, n. 3-4, p. 257–262, 1999.
- HENRY, Ronald C; WANG, Yi-Jin; GEBHART, Kristi A. The relationship between empirical orthogonal functions and sources of air pollution. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, Elsevier, v. 25, n. 2, p. 503–509, 1991.
- HUANG, CH. A theory of dispersion in turbulent shear flow. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 13, n. 4, p. 453–463, 1979.
- _____. On solutions of the diffusion–deposition equation for point sources in turbulent shear flow. *Journal of Applied Meteorology*, v. 38, n. 2, p. 250–254, 1999.
- HUEBNER, Kenneth H *et al.* *The finite element method for engineers*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2001. 744 p.

- JAFARI, Hossein; DAFTARDAR-GEJJI, Varsha. Revised adomian decomposition method for solving a system of nonlinear equations. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 175, n. 1, p. 1–7, 2006.
- JUMARIE, Guy. Fourier's transform of fractional order via mittag-leffler function and modified riemann-liouville derivative. *Journal of applied mathematics & informatics*, Korean Society of Computational and Applied Mathematics, v. 26, n. 5_6, p. 1101–1121, 2008.
- KHALIL, Roshdi *et al.* A new definition of fractional derivative. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 264, p. 65–70, 2014.
- LIN, Jin-Sheng; HILDEMANN, Lynn M. Analytical solutions of the atmospheric diffusion equation with multiple sources and height-dependent wind speed and eddy diffusivities. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 30, n. 2, p. 239–254, 1996.
- MACHADO, J Tenreiro; MAINARDI, Francesco; KIRYAKOVA, Virginia. Fractional calculus: Quo vadimus?(where are we going?). *Fractional Calculus and Applied Analysis*, De Gruyter, v. 18, n. 2, p. 495–526, 2015.
- MANDELBROT, Benoit B; MANDELBROT, Benoit B. *The fractal geometry of nature*. [S.l.]: WH freeman New York, 1982. v. 1.
- MANGIA, C *et al.* Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 36, n. 1, p. 67–76, 2002.
- MEERSCHAERT, Mark M; TADJERAN, Charles. Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations. *Journal of computational and applied mathematics*, Elsevier, v. 172, n. 1, p. 65–77, 2004.
- METZLER, Ralf *et al.* Anomalous diffusion models and their properties: non-stationarity, non-ergodicity, and ageing at the centenary of single particle tracking. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Royal Society of Chemistry, v. 16, n. 44, p. 24128–24164, 2014.
- MOREIRA, DM *et al.* Simulation of the dispersion of pollutants using two approaches for the case of a low source in the sbl: evaluation of turbulence parameterisations. *Water, Air, and Soil Pollution*, Springer, v. 161, n. 1, p. 285–297, 2005b.
- _____. _____. *Water, Air, and Soil Pollution*, Springer, v. 161, n. 1, p. 285–297, 2005d.
- MOREIRA, Davidson; MORET, Marcelo. A new direction in the atmospheric pollutant dispersion inside the planetary boundary layer. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, American Meteorological Society, v. 57, n. 1, p. 185–192, 2018.
- MOREIRA, DM *et al.* Semi-analytical model for pollution dispersion in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 14, p. 2673–2681, 2005.
- _____. _____. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 14, p. 2673–2681, 2005c.
- MOREIRA, Davidson; TIRABASSI, Tiziano. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. *Ambiente & sociedade*, SciELO Brasil, v. 7, n. 2, p. 159–172, 2004.
- MOREIRA, Davidson; VILHENA, Marco. *Air pollution and turbulence: modeling and applications*. [S.l.]: CRC Press, 2009.

MOREIRA, DM *et al.* The gillt solution of the advection–diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary pbl. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 40, n. 17, p. 3186–3194, 2006b.

_____. Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new gillt method. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 34, p. 6289–6294, 2005a.

MOREIRA, Davidson Martins *et al.* A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 83, p. 254–259, 2014.

MOREIRA, Davidson Martins; SANTOS, Cassia Aparecida Gobeti dos. New approach to handle gas-particle transformation in air pollution modelling using fractional derivatives. *Atmospheric Pollution Research*, Elsevier, v. 10, n. 5, p. 1577–1587, 2019.

MOREIRA, Davidson M; TIRABASSI, Tiziano; CARVALHO, Jonas C. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 39, n. 20, p. 3643–3650, 2005e.

MOREIRA, Davidson M *et al.* Simulation of pollutant dispersion in the atmosphere by the laplace transform: the admm approach. *Water, air, and soil pollution*, Kluwer Academic Publishers, v. 177, n. 1, p. 411–439, 2006a.

NIEUWSTADT, FTM. An analytic solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 14, n. 12, p. 1361–1364, 1980.

OLDHAM, KB; SPANIER, J. The fractional calculus, academic press, new york. *The fractional calculus*. Academic Press, New York., 1974.

ORTIGUEIRA, Manuel D; MACHADO, JA Tenreiro. What is a fractional derivative? *Journal of computational Physics*, Elsevier, v. 293, p. 4–13, 2015.

PALMEIRA, Anderson; XAVIER, Paulo; MOREIRA, Davidson. Simulation of atmospheric pollutant dispersion considering a bi-flux process and fractional derivatives. *Atmospheric Pollution Research*, Elsevier, v. 11, n. 1, p. 57–66, 2019.

PARLANGE, Jean-Yves. Theory of water-movement in soils: I. one-dimensional absorption. *Soil science*, LWW, v. 111, n. 2, p. 134–137, 1971.

PENG, C-K *et al.* Long-range anticorrelations and non-gaussian behavior of the heartbeat. *Physical review letters*, APS, v. 70, n. 9, p. 1343, 1993.

PIMENTEL, LCG *et al.* Assessment of the unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation for stable conditions. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 470, n. 2167, p. 20140021, 2014.

PIRANIAN, George. The set of nondifferentiability of a continuous function. *The American Mathematical Monthly*, Taylor & Francis, v. 73, n. 4P2, p. 57–61, 1966.

PODLUBNY, Igor. *Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications*. [S.l.]: Elsevier, 1998.

- RICHARDSON, Lewis Fry. Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, The Royal Society London, v. 110, n. 756, p. 709–737, 1926.
- RIZZA, U *et al.* Development of a grid-dispersion model in a large-eddy-simulation-generated planetary boundary layer. *Il nuovo cimento C*, Societa italiana di fisica, v. 26, n. 3, p. 297–309, 2003.
- ROSS, Bertram. *Fractional calculus and its applications: proceedings of the international conference held at the University of New Haven, June 1974*. [S.l.]: Springer, 1974. v. 457.
- SABA, M; QUIÑONES-BOLAÑOS, EE; LÓPEZ, Aida Liliana Barbosa. A review of the mathematical models used for simulation of calcareous stone deterioration in historical buildings. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 180, p. 156–166, 2018.
- SCHUMER, Rina; MEERSCHAERT, Mark M; BAEUMER, Boris. Fractional advection-dispersion equations for modeling transport at the earth surface. *Journal of Geophysical Research: Earth Surface*, Wiley Online Library, v. 114, n. F4, 2009.
- SCRIVEN, RA; FISHER, BEA. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout—ii. the effect of turbulent diffusion. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 9, n. 1, p. 59–68, 1975.
- SHARAN, Maithili; GOPALAKRISHNAN, SG. Mathematical modeling of diffusion and transport of pollutants in the atmospheric boundary layer. *Pure and Applied Geophysics*, Springer, v. 160, n. 1, p. 357–394, 2003.
- SHARAN, Maithili; KANSA, EJ; GUPTA, Suman. Application of the multiquadric method for numerical solution of elliptic partial differential equations. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 84, n. 2-3, p. 275–302, 1997.
- SHARAN, Maithili; MODANI, Manish. A two-dimensional analytical model for the dispersion of air-pollutants in the atmosphere with a capping inversion. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 40, n. 19, p. 3479–3489, 2006.
- SHLESINGER, MF; WEST, BJ; KLAFTER, Joseph. Lévy dynamics of enhanced diffusion: Application to turbulence. *Physical Review Letters*, APS, v. 58, n. 11, p. 1100, 1987.
- SHLESINGER, Michael F; KLAFTER, Joseph; WEST, Bruce J. Levy walks with applications to turbulence and chaos. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 140, n. 1-2, p. 212–218, 1986.
- SINGH, MP; YADAV, Anil Kumar *et al.* Mathematical model for atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 30, n. 7, p. 1137–1145, 1996.
- SMITH, FB. The diffusion of smoke from a continuous elevated point-source into a turbulent atmosphere. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 2, n. 1, p. 49–76, 1957.
- SPOHN, Herbert. Surface dynamics below the roughening transition. *Journal de Physique I*, EDP Sciences, v. 3, n. 1, p. 69–81, 1993.

- SREENIVASAN, KR; MENEVEAU, CJFM. The fractal facets of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 173, p. 357–386, 1986.
- STEPHENSON, John. Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 222, n. 1-4, p. 234–247, 1995.
- SUCCURRO, Antonella; EBENHÖH, Oliver. Review and perspective on mathematical modeling of microbial ecosystems. *Biochemical Society Transactions*, Portland Press Ltd., v. 46, n. 2, p. 403–412, 2018.
- TARASOV, Vasily E. No nonlocality. no fractional derivative. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 62, p. 157–163, 2018.
- TAYLOR, Geoffrey I. Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the london mathematical society*, Wiley Online Library, v. 2, n. 1, p. 196–212, 1922.
- TEODORO, G Sales; MACHADO, JA Tenreiro; OLIVEIRA, E Capelas De. A review of definitions of fractional derivatives and other operators. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 388, p. 195–208, 2019.
- TIRABASSI, T. Analytical air pollution advection and diffusion models. *Water, Air, and Soil Pollution*, Springer, v. 47, n. 1, p. 19–24, 1989.
- TIRABASSI, Tiziano. Operational advanced air pollution modeling. *Pure and Applied Geophysics*, Springer, v. 160, n. 1, p. 5–16, 2003.
- TIRABASSI, Tiziano *et al.* A two-dimensional solution of the advection–diffusion equation with dry deposition to the ground. *Journal of applied meteorology and climatology*, v. 47, n. 8, p. 2096–2104, 2008.
- TIRABASSI, T; TAGLIAZUCCA, M; ZANNETTI, P. Kappa-g, a non-gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements. *Journal of the Air Pollution Control Association*, Taylor & Francis, v. 36, n. 5, p. 592–596, 1986.
- ULDEN, AP Van. Simple estimates for vertical diffusion from sources near the ground. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 12, n. 11, p. 2125–2129, 1978.
- _____. A surface-layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, Elsevier, v. 26, n. 4, p. 681–692, 1992.
- VILHENA, MT *et al.* An analytical air pollution model: development and evaluation. *Beitrage zur Physik der Atmosphäre-Contributions to Atmospheric Physics*, Oxford: Pergamon Press; Braunschweig: Vieweg,[1969]-c1999., v. 71, n. 3, p. 315–320, 1998.
- WORTMANN, S *et al.* A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the pbl. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 12, p. 2171–2178, 2005.
- WYNGAARD, John C. Structure of the pbl. In: *Lectures on Air Pollution Modeling*. [S.l.]: Springer, 1988. p. 9–61.
- XU, Huanying; JIANG, Xiaoyun; YU, Bo. Numerical analysis of the space fractional navier–stokes equations. *Applied Mathematics Letters*, Elsevier, v. 69, p. 94–100, 2017.
- YEH, Gour-Tsyh; HUANG, Chin-Hua. Three-dimensional air pollutant modeling in the lower atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 9, n. 4, p. 381–390, 1975.

YU, Xin; LEITNER, David M. Anomalous diffusion of vibrational energy in proteins. *The Journal of chemical physics*, American Institute of Physics, v. 119, n. 23, p. 12673–12679, 2003.

ZASLAVSKY, George M. Fractional kinetic equation for hamiltonian chaos. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Elsevier, v. 76, n. 1-3, p. 110–122, 1994.

ZIENKIEWICZ, OC; TAYLOR, RL. *The finite element method*, Butterworth Heinemann. [S.l.]: Oxford, 2000. 1440 p.