Sistema FIEB



CENTRO UNIVERSITÁRIO SENAI CIMATEC

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL E TECNOLOGIA INDUSTRIAL Doutorado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

Tese de Doutorado

Uma nova perspectiva na solução da equação de advecção-difusão fracionária usando o método GILTT e derivadas conformáveis

Apresentada por: André Luiz Santos da Soledade Orientador: Dr. Davidson Martins Moreira

Março2024

André Luiz Santos da Soledade

Uma nova perspectiva na solução da equação de advecção-difusão fracionária usando o método GILTT e derivadas conformáveis

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: Interdisciplinar Orientador: Dr. Davidson Martins Moreira *Centro Universitário SENAI CIMATEC*

Salvador Centro Universitário SENAI CIMATEC 2024

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do Centro Universitário SENAI CIMATEC

Soledade, André Luiz Santos da Uma nova perspectiva na solução da equação de advecção-difusão fracionária usando o método GILTT e derivadas conformáveis / André Luiz Santos da Soledade. – Salvador, 2024. 152 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, 2024. Inclui referências. Difusão anômala. 2. Derivada fracionária. 3. Derivada conformável. 4. α-GILTT. Equação de advecção-difusão. 6. Poluição atmosférica. 7. Fonte de curta de duração. I. Centro Universitário SENAI CIMATEC. II. Moreira, Davidson Martins. III. Título.

CDD 620.00113



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 perspectiva na solução da equação de advecção-difusão fracionária usando o método GILTT e derivadas conformáveis.", apresentada no dia 14 de março de 2024, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Doutor em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial.

Orientador:	Assinado eletronicamente por: Davidson Martins Moreira CPF: ***.832.500-** Data: 14/03/2024 16:01:28 -03:00 ERREI Prof. Dr. Davidson Martins Moreira
	SENAI CIMATEC
Membro Interno:	Assinado eletronicamente por: Roberto Luiz Souza Monteiro CPF: ***.881.935-** Data: 04/04/2024 10:46:47 -03:00 FERRET Prof. Dr. Roberto Luiz Souza Monteiro SENAI CIMATEC
Membro Interno:	Assinado eletronicamente por: Fernando Luiz Pellegrini Pessoa CPF: ***.470.585-** Data: 14/03/2024 17:25:16 -03:00 55777 Prof. Dr. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa SENAI CIMATEC
Membro Externo:	Assinado eletronicamente por: Antonio Jose da Silva Neto CPF: ***.478.197-** Data: 15/03/2024 11:11:22 -03:00
Membro Externo:	Assinado eletronicamente por: Vânia Gonçalves de Brito dos Santos CPF: ***.449.445-** Data: 14/03/2024 20:57:56 -03:00 EXAMP Prof. ^a Dr. ^a Vania Goncalves de Brito dos Santos UNEB

Esse documento foi assinado por Davidson Martins Moreira, Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, Vânia Gonçalves de Brito dos Santos, Antonio Jose da Silva Neto e Roberto Luiz Souza Monteiro . Para validar o documento e suas assinaturas acesse https://assinatura.senaibahia.com.br/validate/LLCML-LFZEZ-VN6LB-5RM85



Sonho que se sonha só, é apenas um sonho, mas sonho que se sonha junto é realidade!

Agradeço a Deus pela dádiva da saúde e pela força que me proporcionou para superar as adversidades.

Expresso minha profunda gratidão ao Centro Universitário SENAI CIMATEC, ao seu corpo docente, à direção e à administração, pelo apoio financeiro e pela valiosa oportunidade.

Ao Prof. Dr. Davidson Martins Moreira, meu sincero agradecimento pelo suporte contínuo, orientação exemplar e incentivos fundamentais ao longo deste percurso acadêmico.

Aos Professores Dr. Silva Neto, Dra. Vânia Santos, Dr. Fernando Pellegrini e Dr. Roberto Monteiro, expresso minha profunda gratidão pelas valiosas sugestões e contribuições fornecidas para este trabalho. À Dra. Daniela Buske, agradeço sinceramente por compartilhar as rotinas computacionais de seu trabalho de doutorado, as quais foram fundamentais para o desenvolvimento deste estudo.

Agradeço de coração aos meus amados pais, Elisa Ramos dos Santos e Dermeval da Soledade (*in memoriam*), pelo dom da vida, pela dedicação incansável à minha educação e pelos inestimáveis valores éticos que sempre cultivaram. Suas influências não contribuíram apenas para a minha formação, mas também moldaram o ser humano que sou hoje. À minha querida esposa Rejane e aos meus amados filhos Luiz, Kamila e Kaio, expresso profunda gratidão pelo amor incondicional, apoio constante e incentivo incansável. Vocês são minha fonte de inspiração e força.

Estendo meus agradecimentos a todos que, de maneira direta ou indireta, contribuíram para a minha formação acadêmica. O meu muito obrigado a cada um de vocês.

Salvador, Brasil 06 de Março 2024 André Luiz Santos da Soledade

i

Resumo

A dispersão de poluentes na atmosfera é uma fonte permanente de problemas desafiadores, sendo um deles a compreensão da difusão anômala provocada pela turbulência atmosférica. Essa questão demanda novos paradigmas, e é nesse contexto que surge um crescente interesse nas equações diferenciais parciais fracionárias. Esse tipo de modelagem oferece uma abordagem inovadora para compreender a complexidade da turbulência, preenchendo a lacuna deixada pelas equações diferenciais tradicionais, as quais falham em descrever completamente a difusão turbulenta na atmosfera. Esse avanço gerou desafios adicionais na busca por soluções, visto que a maioria das métodos existentes é voltada para equações diferenciais de ordem inteira. Nesse cenário, o presente estudo pretende explorar o potencial das derivadas fracionárias na modelagem matemática da dispersão de poluentes. Para alcançar esse objetivo, a presente tese propõe a resolução de dois modelos distintos da equação de advecção-difusão fracionária, um para o caso bidimensional transiente e outro para o caso bidimensional estacionário. Para tanto, foram combinados o método GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Ttechnique) e a derivada conformável. No primeiro modelo, foram introduzidos parâmetros fracionários em todos os termos da equação, enquanto no segundo modelo foram considerados parâmetros fracionários nos termos advectivo longitudinal e difusivos. Esse procedimento permite levar em conta o comportamento anômalo no processo de dispersão, resultando em uma nova metodologia denominada α -GILTT. As simulações foram comparadas com dados de concentrações integradas lateralmente ao nível do solo dos experimentos de Copenhagen e Prairie Grass. No caso do modelo transiente, os resultados estatísticos da concentração de poluentes no nível do solo mostraram pouca influência dos parâmetros fracionários em condições de baixa fracionalidade, pois o experimento de Copenhagen é considerado moderadamente instável. No entanto, os testes de sensibilidade com os parâmetros fracionários permitem concluir que eles exercem uma influência efetiva no controle da difusão e advecção de poluentes na atmosfera, sugerindo dependência com a estabilidade atmosférica. Quanto ao modelo estacionário, os resultados estatísticos indicam que os parâmetros fracionários têm pouca influência nos experimentos de Copenhagen (moderadamente instável) com as parametrizações usadas em condições de baixa fracionalidade. No entanto, para o experimento Prairie Grass (fortemente convectivo), os resultados mostraram maior dependência dos parâmetros fracionários (ordem inteira: MSE = 0.90, COR = 0.81, FAT2 = 0.63; ordem não inteira: NMSE = 0.56, COR = 0.89, FAT2 = 0.84), sugerindo que os parâmetros fracionários são dependentes da estabilidade atmosférica e que podem ser usados, juntamente com uma boa parametrização dos parâmetros físicos tradicionais (perfis de vento e coeficiente de difusão), para melhorar o processo de dispersão de poluentes atmosféricos. Por fim, uma fonte de curta duração foi adicionada ao modelo transiente. Testes de sensibilidade demonstraram que os parâmetros fracionários têm influência no comportamento de dispersão da nuvem de poluentes para pontos situados próximos à fonte.

Palavras-chave: difusão anômala; derivada fracionária; derivada conformável; α -GILTT; equação de advecção-difusão; poluição atmosférica; fonte de curta duração.

Abstract

The dispersion of pollutants in the atmosphere is a perpetual source of challenging issues due to its intrinsic physical complexity, one of which is the description of anomalous diffusion caused by atmospheric turbulence. This matter calls for new paradigms, and it is within this context that a growing interest in fractional partial differential equations arises. Such modeling provides a fresh perspective to analyze and comprehend turbulence complexity, bridging the gap left by traditional differential equations, which fail to adequately describe turbulent diffusion in the atmosphere. This advancement brings forth new challenges in seeking solutions, as most existing approaches are based on techniques applied to integer-order differential equations. Given this scenario, the primary objective of this study is to explore the potential of fractional derivatives in the mathematical modeling of atmospheric pollutant dispersion. To achieve this goal, this thesis proposes the resolution of two distinct models of the fractional advection-diffusion equation. The first model addresses the transient two-dimensional fractional advection-diffusion equation, while the second deals with the stationary two-dimensional fractional advection-diffusion equation. To this end, the GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) method and the conformable derivative are combined. In the first model, fractional parameters are introduced in all terms of the equation, whereas in the second model, fractional parameters are considered in the longitudinal advective and diffusive terms. This procedure allows for the consideration of anomalous behavior in the dispersion process, resulting in a new methodology called α -GILTT. Simulations were compared with ground-level integrated concentration data from the Copenhagen and Prairie Grass experiments. In the case of the transient model, statistical results of pollutant concentration at ground level showed little influence of fractional parameters under low fractional conditions, as the Copenhagen experiment is considered moderately unstable. However, sensitivity tests with fractional parameters allow the conclusion that they exert an effective influence on controlling pollutant diffusion and advection in the atmosphere, suggesting dependence on atmospheric stability. Regarding the stationary model, statistical results indicate that fractional parameters have little influence in the Copenhagen experiments (moderately unstable) with the parameterizations used under low fractional conditions. However, for the Prairie Grass experiment (strongly convective), results showed greater dependence on fractional parameters (integer order: NMSE = 0.90, COR = 0.81, FAT2 = 0.63; noninteger order: NMSE = 0.56, COR = 0.89, FAT2 = 0.84), suggesting that fractional parameters are dependent on atmospheric stability and can be used, along with good parameterization of traditional physical parameters (wind profiles and diffusion coefficients), to improve the atmospheric pollutant dispersion process. Lastly, a short-duration source was added to the transient model. Sensitivity tests demonstrated that fractional parameters influence the pollutant dispersion behavior for points located near the source.

Keywords: anomalous diffusion; fractional derivative; conformable derivative; α -GILTT; advection-diffusion equation; atmospheric pollution; short-duration source.

Sumário

1	Intr 1.1 1.2	odução Hipótese da pesquisa	1 3 4
	1.3	1.2.1 Objetivos especificos	4 4
2	Rev	isão Bibliográfica	7
ર	Can	anda Limita Planotária (CLP)	11
J	3.1	Estrutura da atmosfera	1 1
	3.2	Camada Limite Planetária	11
	-	3.2.1 Camada Limite Convectiva (CLC)	13
		3.2.1.1 Camada Superficial (CS)	14
		3.2.1.2 Camada de Mistura (CM):	15
		3.2.1.3 Camada interfacial ou zona de entranhamento (ZE)	16
		3.2.2 Camada Limite Estável (CLE)	16
		3.2.3 Camada Besidual (CR)	17
		3.2.4 Camada Noturna (CN)	17
	3.3	Evolução temporal da Camada Limite planetária	18
	3.4	Turbulência	19
		3.4.1 Turbulência na Camada Limite Planetária (CLP)	21
1	Dro	resses Difusives Usuris e Anômales	ია
4	1 10 1 1	Difusão Usual	4 ປ ດາ
	4.1	4.1.1 O movimento Browniano segundo Finstein	20
		4.1.1 O movimento browniano segundo Langevin	24 96
		4.1.2 O movimento browniano segundo Langevin	20
		4.1.5 A difusão anomaia	21
5	Cálo	culo Fracionário	32
	5.1	História do Cálculo Fracionário	32
	5.2	Derivadas Fracionárias Clássicas	40
0	<u>a</u> u		40
6		culo Diferencial e Integral Conformavel	42
	6.1		42
	6.2	Integral conformável	44
7	Solu	ıção da Equação de Advecção-Difusão conformável	46
	7.1	Equação de advecção-difusão de ordem inteira	46
	7.2	Solução da equação de advecção-difusão bidimensional estacionária confor-	
		$m \acute{a} vel \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots $	48
	7.3	Métodos numéricos de inversão da transformada de Laplace	54
		7.3.1 Inversão numérica por Quadratura Gaussiana	54
		7.3.2 Inversão numérica pelo método <i>Fixed Talbot</i>	57
	7.4	Solução da equação de advecção-difusão bidimensional transiente conformável	58
		7.4.1 Modelo com derivadas conformáveis nos termos transiente e advec-	
		tivo da equação	58

		7.4.2	Modelo com derivadas conformáveis em todos os termos derivativos da equação	67
8	Exp	erimer	ntos. Parametrizações e Métodos Estatísticos Aplicados na Va-	
-	lida	ção do	s Modelos	74
	8.1	Experi	mento de Copenhagen	74
	8.2	Experi	mento de Prairie Grass	77
	8.3	Indices	s estatísticos	79
		8.3.1	Erro quadrático médio normalizado (NMSE)	79
		8.3.2	Fator de dois (FAT2)	79
		8.3.3	Coeficiente de correlação (COR)	79
		8.3.4	Fração de inclinação (FB)	80
		8.3.5	Desvio fracional padrão (FS)	80
	8.4	Param	etrização da Turbulência Atmosférica	80
	8.5	Perfil o	lo vento	81
9	Res	ultados	5	83
	9.1	Simula	ções utilizando o modelo 1	83
		9.1.1	Resultados do experimento de Copenhagen	84
		9.1.2	Resultados do experimento de Prairie Grass	86
		9.1.3	Análise de sensibilidade	88
	9.2	Simula	ções utilizando o modelo 2.1	90
		9.2.1	Testes dos pontos de Quadratura	91
		9.2.2	Análise de sensibilidade: perfil longitudinal e vertical da concentração	92
		9.2.3	Resultados do experimento de Copenhagen	94
		9.2.4	Simulações utilizando o modelo 2.2	96
		9.2.5	Análise da convergência numérica para o método de inversão <i>fixed</i>	
			Talbot	96
		9.2.6	Avaliação do modelo 2.2(a): conjunto de dados de Copenhagen	97
		9.2.7	Avaliação do modelo 2.2(b): conjunto de dados de Copenhagen	99
			9.2.7.1 Teste de sensibilidade: fonte de curta duração	100
10	Con	clusõe	S	L 03
\mathbf{A}	Def	finiçõe	s, Lemas e Teoremas do Cálculo Fracionário Clássico	L 06
		A.0.1	Derivada fracionária segundo Grünwald-Letnikov	106
		A.0.2	Derivada fracionária segundo Riemann-Liouville	107
		A.0.3	Derivada fracionária segundo Caputo	111
		A.0.4	Critérios para reconhecimento de uma derivada fracionária	112
В	Den	nonstra	ações dos Teoremas do Capítulo Seis	14
Re	Referências 119			

Lista de Tabelas

3.1	Parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov	15
3.2	Regime de escoamento de Reynolds em dutos cilíndricos	20
8.1	Parâmetros micrometeorológicos dos Experimentos de Copenhagen	75
8.2	Concentrações observadas para o experimentos de Copenhagen em diferen-	
	tes distâncias da fonte, normalizadas pela taxa de emissão (c/Q). \ldots	76
8.3	Altura da camada limite planetária $h(m)$ nos experimentos de Copenhagen.	76
8.5	Velocidade de fricção u_* (m/s) para diferentes passos de tempo nos expe-	
	rimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 min	77
8.4	Comprimento de Monin-Obukhov L (m) para diferentes passos de tempo	
	nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 min.	77
8.6	Parâmetros meteorológicos e taxas de emissão do traçador do experimento	
	de Prairie-Grass (Casos instáveis)	78
9.1	Quadro resumo dos modelos desenvolvidos neste trabalho	83
9.2	Quadro resumo das parametrizações, métodos de inversão e fontes adotadas	
	por cada modelo	83
9.3	Valores de parâmetros obtidos na avaliação estatística dos modelos consi-	
	derados usando o conjunto de dados Copenhagen.	84
9.4	Valores dos parâmetros obtidos na avaliação estatística dos modelos consi-	
	derados usando o conjunto de dados Praire Grass	86
9.5	Avaliação estatística do modelo usando o conjunto de dados Copenhagen.	94
9.6	Avaliação estatística do modelo usando o conjunto de dados Copenhagen	97
9.7	Avaliação estatística do modelo usando o conjunto de dados Copenhagen.	100

3.1 3.2 3.3 3.4	Divisão da troposfera	12 17 19 22
4.1	Comportamento do deslocamento quadrático médio para o caso subdifusivo $(n < 1)$, usual $(n = 1)$ o superdifusivo $(n > 1)$	20
4.2	(p < 1), usual $(p = 1)$ e superuntasivo $(p > 1)$	23
4.3	cúspide da função densidade de probabilidade são distintas Comparação das trajetórias de um passeio aleatório browniano ou subdi- fusivo (esquerda) e um voo de Lévy (direita). Enquanto ambas as tra- jetórias são estatisticamente auto-similares, a trajetória de caminhada de Lévy possui uma dimensão fractal, caracterizando a estrutura insular de aglomerados de passos menores, conectados por um passo longo. Ambos os passeios são desenhados para o mesmo número de passos (aprox. 7000).	30 31
8.1	Representação esquemática do experimento de Copenhagen. As posições das unidades de amostragem do rastreador estão representadas na ilustração através de círculos	74
9.1	Gráfico de dispersão observado (c_o) e preditas (c_p) da concentração in- tegrada lateralmente ao nível do solo usando o perfil de vento de simi- laridade e o Experimento de Copenhagen (normalizado com a taxa de emissão (c/Q)). Os dados entre linhas pontilhadas correspondem à razão $c_{c}/c_{c} = [0, 5; 2]$	95
9.2	$C_p/C_o \in [0, 5, 2]$	00
0.9	razão $c_p/c_o \in [0,5;2]$.	87
9.3 9.4	Comportamento do coenciente de difusão vertical $K(z)$ e $K^{(3)}$ Perfil vertical de concentração para três distâncias a jusante ($x = 500, 2.000$	88
0.1	e 5.000 m) e altura da fonte adimensional $h_s/h = 0.01; 0.1 \text{ e } 0.2 \dots \dots$	89
9.5	Concentração integrada lateralmente ao nível do solo, normalizada pela taxa de emissão (c/Q) , em função da distância da fonte para diferentes valores de α e β considerando alturas da fonte de 0 01 <i>h</i> e 0 1 <i>h</i>	90
9.6	Concentração integrada lateralmente, normalizadas pela taxa de emissão (a/O) am função da distância para since instantes de tempos a diferentes	50
	(c/φ) , em função da distancia para cinco instantes de tempos e diferentes pontos de quadratura Gaussiana	91
9.7	Concentrações integradas lateralmente em função da distância, normali- zadas pela taxa de emissão (c/Q) , para diferentes parâmetros fracionários, em dois instantes de tempo, com o mesmo número de pontos de quadratura	
	M=2	92

9.8	Perfil vertical de concentração para três distâncias a jusante ($x = 500, 1000$	
	e 4000 m) e altura da fonte adimensional $h_s/h = 0.01$; 0.1 e 0.2 para t =	
	3600 s	93
9.9	Concentração integrada lateralmente ao nível do solo em função da dis-	
	tância da fonte, normalizadas pela taxa de emissão (c/Q) , para diferentes	
	valores α e β considerando a altura da fonte de 0,01h e 0,1h, para t =	
	3600 s	94
9.10	Gráfico de dispersão das concentrações integrada lateralmente observa-	
	das ao nível do solo (C_o) e Preditas (C_p) , usando o perfil de vento de	
	similaridade e o Experimento de Copenhagen (normalizado com taxa de	
	emissão (c/Q)). Os dados entre linhas pontilhadas correspondem à razão	
	$C_p/C_o \in [0,5;2]$.	95
9.11	Concentrações integradas lateralmente, normalizadas pela taxa de emis-	
	são (c/Q) , em função M^* , onde M^* representa o número de termos do	
	somatório do algoritmo FT.	97
9.12	Gráfico de dispersão das concentrações integrada lateralmente Observa-	
	das ao nível do solo (C_o) e Preditas (C_p) , usando o perfil de vento de	
	similaridade e o Experimento de Copenhagen (normalizado com taxa de	
	emissão (c/Q)). Os dados entre linhas pontilhadas correspondem à razão	
	$C_p/C_o \in [0,5;2]$	99
9.13	Evolução temporal das concentrações integrada lateralmente, normalizada	
	com a taxa de emissão (c/Q), para diferentes tempos de liberação t_r , a	
	distância fixa de 500m da fonte, usando o perfil de vento de similaridade e	
	o Experimento 1 de Copenhagen.	101
9.14	Evolução temporal das concentrações integrada lateralmente, normalizada	
	pela taxa de emissão (c/Q), para diferentes valores de α , β e γ (1,00;	
	0,95; 0,90), a distância fixa de 500m da fonte, usando o perfil de vento de	
	similaridade e o Experimento 1 de Copenhagen	101
9.15	Evolução temporal das concentrações integrada lateralmente, normalizada	
	pela taxa de emissão (c/Q), para diferentes valores de α , β e γ (1,00; 0,95;	
	0,90), a distância fixa de 4000m da fonte, usando o perfil de vento de	
	similaridade e o Experimento 1 de Copenhagen	102

ADMM:	Advection Diffusion Multilayer Model
CN:	Camada Noturna
COR:	Coeficiente de correlação
CR:	Camada Residual
CS:	Camada Superficial
CLE:	Camada Limite Estável
CLC:	Camada Limite Convectiva
CLP:	Camada Limite Planetária
CM:	Camada de Mistura
FA2:	Fator de Dois
FB:	Fração de Inclinação
FS:	Desvio Fracional Padrão
GILTT:	Generalize Integral Laplace Transform Technique
GITT:	Generalize Integral Transform Technique
MSRED:	Model for Simulating Rocket Effluent Dispersion
NMSE:	Erro Quadrático Médio Normalizado
ZE:	Zona de Entranhamento
A_k :	Peso da Quadratura Gaussiana
$A_n(X)$:	Coeficientes desconhecidos da série $c(X, z)$
$\overline{A(s)}$:	Variável transformada do vetor $A(X)$
C:	Concentração média do contaminante passivo (g/m^3)
<i>c</i> :	Concentração média integrada lateralmente (g/m^2)
<i>ī</i> :	Concentração transformada $(T \rightarrow s)$
c_o :	Concentração observadas experimentalmente
c_p :	Concentração preditas pelo modelo
D^* :	Matriz diagonal dos autovalores
k:	Constante de Von Kàrmàm
k_B :	Constante de Boltzmann
K^{efec} :	Coeficiente de difusão efetivo
K_c :	Coeficiente de difusão obtido por Einstein
K_x :	Coeficiente de difusão na direção $x \ (m^2/s)$
K_y :	Coeficiente de difusão na direção $y \ (m^2/s)$
K_z :	Coeficiente de difusão na direção $z \ (m^2/s)$
<i>l</i> :	Distância entre os vizinhos q
L:	Comprimento de Obukov (m)
M^* :	Número de termos do somatório do algoritmo FT
N:	Número de autovalores ou ordem de truncamento da fórmula da inversa.
N_0 :	Função $\nu(x,t)$ normalizada
N_A :	Número de Avogadro
$N_i \in N_j$:	Normas das autofunções ψ_i
P_k :	Raízes da Quadratura Gaussiana
q:	Nomenclatura adotada por Richardson para representar o número de vizinhos por comprimento
Q:	Intensidade da fonte (g/s)
R:	Constante dos gases ideais
Re:	Número de Reynolds
t:	Tempo (s)

<i>+</i> .	Paríodo de duração de liberação de fonte
v_r .	Temperature de fluide
	Temperatura do Indo
\overline{T}_{0} :	Derive de conformi facil de codore elfe
I_{α} :	Derivada conformavel de ordem alla $V_{closicion}$ (m (r))
u:	Velocidade media do vento orientado na direção $x (m/s)$
<i>u</i> _* :	Velocidade de fricção na superficie (m/s)
<i>u</i> :	Velocidade característica do escoamento na CLP (m/s)
V:	Velocidade do fluido (m/s)
<i>v</i> :	Componente do vento médio na direção transversal
u(x,t):	Número de partículas por unidade de volume no instante de tempo t e posição x
W:	Matriz das autofunções de G
w_* :	Escala de velocidade convectiva (m/s)
w:	Componente do vento médio na direção vertical
W^{-1} :	Matriz inversa das autofunções
$\left(\overline{w'T'}\right)$:	Fluxo de calor sensível turbulento na superfície
X^* :	Distância adimensional
$x, y \in z$:	Coordenadas espaciais
\mathscr{L}^{-1} :	Operador transformada inversa de Laplace
α, β, γ :	Parâmetros fracionários
Δ :	Deslocamento das partículas em um intervalo de tempo ao longo de uma direção específica
α_c :	Coeficiente de fricção relacionado com a viscosidade do meio
γ :	Parâmetros fracionários
δ:	Função delta de dirac
η :	Função de Heaviside
λ_i :	Autovalores oriundos do problema de Sturm-Liouville
μ :	Viscosidade dinâmica
$\overline{\eta}$:	Viscosidade do solvente
ρ :	Massa específica do fluido
σ :	Raio das partículas suspensas no fluido
ς:	Viscosidade cinemática do fluido na CLP
ξ:	Parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov
$\phi \in \varphi$:	Parâmetros de correção da dimensionalidade
$\psi_i(z)$:	Autofunções oriundas do problema de Sturm-Liouville

Capítulo Um

Introdução

Nos últimos anos, a difusão anômala tem sido objeto de estudo de diversos pesquisadores em várias áreas, como física, química, biologia e engenharia, dada sua relevância na compreensão de sistemas complexos (SILVA *et al.*, 2019; BEVILACQUA *et al.*, 2016; ZHOKH; TRYPOLSKYI; STRIZHAK, 2017; JIANG *et al.*, 2018; OLIVEIRA *et al.*, 2019). Este fenômeno é relevante na compreensão de uma grande variedade de sistemas, como difusão em plasmas (BERRYMAN, 1977), difusão em fluidos turbulentos (SHLESINGER; KLAF-TER; WEST, 1986), transporte de fluidos em meios porosos (SPOHN, 1993), difusão em fractais (STEPHENSON, 1995), difusão anômala em superfícies líquidas (BYCHUK; O'SHAUGHNESSY, 1995), estudo da energia vibracional em proteínas (YU; LEITNER, 2003), entre outros sistemas físicos (VAYTET *et al.*, 2018; GOMES *et al.*, 2018; REIS; BOLSTER; VOLLER, 2018; GUN; KAIKAI; RUI, 2017).

Neste contexto, uma das aplicações mais relevantes da difusão anômala é na descrição da difusão turbulenta na atmosfera. Richardson (1926) foi o pioneiro na compreensão dessa classe de fenômeno e concluiu que as variações do vento são tão aleatórias em magnitude e direção que provavelmente não poderiam ser descritas por meio de funções analíticas. Diante disso, ele sugeriu que o campo de velocidade do vento fosse descrito por meio de uma função Weierstrass, uma vez que, esse tipo de função é contínua em todos os pontos, mas não é diferenciável em nenhum deles. Além disso, Richardson observou que a largura das plumas de poluentes, emitidas por fontes pontuais, crescia proporcionalmente a t^{β} , onde $\beta \ge 3$, o que é inconsistente com a difusão típica, onde tem-se $\beta = 1$. Assim, ele constatou que as equações diferenciais clássicas e seu análogo hidrodinâmico, as equações de Navier-Stokes, não conseguiam modelar adequadamente o fluxo irregular do vento (WEST; BOLOGNA; GRIGOLINI, 2003). Meio século depois, Mandelbrot (1982) estabeleceu que os campos turbulentos de velocidade são processos estatísticos fractais, e que o modelo de turbulência em cascata de vórtice formulado por Kolmogorov (1991) era, na verdade, um fractal dinâmico, de forma que a turbulência não possui uma escala característica de tempo ou espaço (WEST, 2014).

No âmbito da modelagem da poluição do ar, existem diversos estudos na literatura os quais buscam aprimorar a compreensão da difusão anômala. A razão disso é que os modelos clássicos, que se baseiam na solução da equação de advecção-difusão, não conseguem descrever de maneira adequada a dinâmica da difusão anômala provocada pela turbulência. Tal limitação decorre do fato de que os parâmetros do sistema geralmente crescem de maneira mais rápida do que as soluções obtidas por esses modelos, implicando na necessidade de se adotar novas abordagens (WEST, 2014). Uma possibilidade para lidar com esse problema é modificar os modelos Eulerianos por meio da introdução de uma dependência temporal ou espacial adequada em seus coeficientes de difusão e perfis médios de velocidade (VENKATRAM, 2015). No entanto, essas funções são normalmente escolhidas para ajustar dados experimentais ou obtidas a partir da teoria da difusão estatística de Taylor (1922). Neste sentido, a modelagem convencional tem se mostrado insuficiente para descrever a complexidade inerente a esse fenômeno, embora tenha servido de base para a resolução de muitos problemas nas ciências físicas, sociais e da engenharia nas últimas décadas. Assim, compreender a complexidade como uma classe estendida de problemas com propriedades comuns, requer uma nova forma de modelagem e, consequentemente, formas inovadoras de pensamento (WEST; BOLOGNA; GRIGOLINI, 2003).

Neste contexto, estudos realizados nas últimas décadas indicam que o cálculo fracionário é a teoria matemática mais apropriada para abordar a complexidade da difusão anômala, conforme descrito em Metzler & Klafter (2000), Rossato *et al.* (2007), Zhokh, Trypolskyi & Strizhak (2017), Evangelista & Lenzi (2018). Na literatura, existem diversas formulações para as derivadas de ordem fracionária, cada uma com suas vantagens e desvantagens, utilizadas em diferentes situações, dependendo da aplicação (TEODORO; MACHADO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2019). As formulações mais relevantes e amplamente estudadas são as de Riemann-Liouville, Caputo e Grunwald-Letnikov, principalmente devido aos seus comportamentos não-locais, que são responsáveis pelos efeitos de memória (CHEN; SUN; LI, 2022).

Embora as derivadas de ordem fracionária sejam operadores lineares, elas não possuem as mesmas propriedades das derivadas de ordem inteira, como a regra do produto, regra do quociente e regra da cadeia. A ausência dessas propriedades torna a manipulação matemática dos modelos mais desafiadora, muitas vezes requerendo o uso de métodos numéricos mais complexos. Em busca de alternativas, nos últimos anos, várias formulações da derivada de ordem fracionária foram propostas. Khalil *et al.* (2014) introduziram uma nova definição de derivada fracionária chamada derivada conformável, a qual possui um caráter local. Essa definição difere das definições tradicionais, preservando as propriedades operacionais da derivada de Newton (BABAKHANI; DAFTARDAR-GEJJI, 2002; CHEN; YAN; ZHANG, 2010; ATANGANA, 2015), o que a torna uma alternativa interessante para a manipulação de equações diferenciais fracionárias.

Devido ao compartilhamento de várias propriedades operacionais com a derivada usual, as derivadas conformáveis têm sido aplicadas em várias áreas da ciência, como mecânica newtoniana (CHUNG, 2015), mecânica quântica (ANDERSON; ULNESS, 2015), transporte difusivo (IYIOLA *et al.*, 2017; AVCI; EROĞLU; ÖZDEMIR, 2017; ZHOU; YANG; ZHANG, 2018) e processos estocásticos (ÇENESIZ; KURT; NANE, 2017). No entanto, é importante mencionar que há uma discussão na comunidade científica questionando se a derivada conformável é uma derivada fracionária. Isso ocorre porque a derivada conformável transforma uma derivada de ordem fracionária em uma derivada de ordem inteira, o que resulta na perda do caráter não-local introduzido pelas derivadas fracionárias tradicionais, como as derivadas de Caputo e Riemann-Liouville (TARASOV, 2018; ABDELHAKIM; MACHADO, 2019; ABDELHAKIM, 2019; ANDERSON; CAMRUD; ULNESS, 2018). Contudo, em problemas de dispersão de poluentes, é possível compensar o efeito de memória utilizando coeficientes de difusão que levam em consideração a distância da fonte (MOREIRA *et al.*, 2005). Além disso, as derivadas conformáveis têm a vantagem de introduzir os parâmetros fracionários na solução do problema, além de obedecer às regras do cálculo tradicional.

A literatura mostra uma variedade de artigos que tratam da solução da equação de advecção-difusão clássica de ordem inteira aplicados em problemas de dispersão de poluentes atmosféricos (MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA; FERREIRA NETO; CARVALHO, 2005; MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA *et al.*, 2009; MOREIRA *et al.*, 2014; SHARAN; MODANI, 2006; GUERRERO *et al.*, 2012; PIMENTEL *et al.*, 2014; ALBANI; ALBANI; SILVA NETO, 2020; ALBANI *et al.*, 2021; ALBANI *et al.*, 2022; ALBANI *et al.*, 2023). Contudo, nos últimos anos, as derivadas fracionárias têm sido utilizadas para aplicações práticas na modelagem da poluição do ar (MOREIRA; MORET, 2018; ACIOLI; XAVIER; MOREIRA, 2019; MOREIRA; SANTOS, 2019; XAVIER; NASCIMENTO; MOREIRA, 2019; MOREIRA, 2019; PALMEIRA; XAVIER; MOREIRA, 2020; SOLEDADE; MOREIRA, 2022).

Neste trabalho, propõe-se um avanço significativo ao introduzir parâmetros fracionários nos termos transiente, difusivo e advectivo da equação de dispersão de poluentes. Essa abordagem, em conjunto com as derivadas conformáveis, leva em consideração o comportamento anômalo do problema, resultando em uma nova metodologia chamada método α -GILTT. Essa metodologia utiliza uma solução em séries e permite a utilização de coeficientes de difusão e velocidade do vento que dependem da coordenada espacial z, levando em consideração a falta de homogeneidade da turbulência na direção vertical. Essa metodologia combina os métodos GILTT (WORTMANN *et al.*, 2005; MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA *et al.*, 2005; TIRABASSI *et al.*, 2008; BUSKE DANIELA *et al.*, 2017) com o conceito de derivadas conformáveis (KHALIL *et al.*, 2014).

Para alcançar o objetivo proposto, esta tese apresenta 3 soluções inovadoras para diferentes variações das equações de advecção-difusão bidimensionais fracionárias. Primeiramente, é apresentada a solução analítica para a equação estacionária de advecção-difusão fracionária, na qual são considerados termos fracionários distintos em todas as derivadas. Em seguida, é obtida a solução semianalítica para a equação de advecção-difusão transiente fracionária, levando em conta parâmetros fracionários no termo transiente e difusivo. Por fim, é proposta uma solução semianalítica para a equação transiente de advecção-difusão, incorporando termos fracionários em todas as derivadas e introduzindo uma condição de fonte de curta duração.

1.1 Hipótese da pesquisa

A inserção de derivadas conformáveis nos termos transientes, difusivo e advectivo da equação de advecção-difusão proporciona uma descrição mais precisa e realística da evolução temporal e espacial da difusão anômala.

1.2 Objetivo geral

• Aprimorar a descrição do processo de difusão anômala em ambientes turbulentos através da inserção de derivadas conformáveis na equação de advecção-difusão, solucionando-a em cenários tanto estacionários quanto transientes.

1.2.1 Objetivos específicos

- Elaborar novos modelos a partir da equação de advecção-difusão clássica, introduzindo parâmetros fracionários distintos em todas as suas derivadas;
- Formular métodos analíticos e semi-analíticos para obter a solução da equação de advecção-difusão fracionária, utilizando o método GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) e as derivadas conformáveis;
- Investigar e avaliar a contribuição das derivadas conformáveis na descrição do processo de difusão anômala, considerando seus efeitos não lineares;
- Avaliar a contribuição de coeficientes de difusão verticais e perfis de vento dependentes da variável espacial z na solução da equação de advecção-difusão fracionária, considerando a falta de homogeneidade da turbulência na direção desta coordenada;
- Determinar a escala de comprimento mais adequada para os parâmetros de correção da dimensão, visando otimizar a representação da difusão anômala e obter uma melhor concordância entre os resultados simulados e experimentais;
- Validar os resultados obtidos a partir dos modelos propostos , comparando-os com dados experimentais disponíveis na literatura, a fim de avaliar a sua precisão e confiabilidade;

1.3 Metodologia

No presente estudo a estrutura matemática da equação de advecção-difusão foi modificada, introduzindo-se parâmetros fracionários nos termos transiente, difusivo e advectivo. Em seguida, os termos derivativos de ordem fracionária são substituídos por derivadas conformáveis, ajustando-se a equação conforme necessário.

4

Posteriormente, é aplicada a técnica conhecida como GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Nesse método, a concentração de poluente é expandida em séries associadas às autofunções obtidas a partir do problema auxiliar de Sturm-Liouville. Em seguida, essa expansão é substituída na equação de advecção-difusão, resultando em um sistema de equações diferenciais. Finalmente, para resolver esse sistema de equações, a transformada de Laplace e o processo de diagonalização são aplicados. No caso das equações de advecção-difusão transientes é necessária a aplicação de um método de inversão numérica. Nesse trabalho foram aplicados os métodos *Fixed Talbolt* e da quadratura Gaussiana. Essa abordagem permite a obtenção de solução analítica ou semi-analítica para a concentração de poluente ao longo do tempo e do espaço, levando em conta os parâmetros fracionários introduzidos.

As etapas descritas nesta seção serão detalhadas ao longo deste trabalho.

Este documento apresenta 10 capítulos e está estruturado da seguinte forma:

- Capítulo 1 Introdução: Fornece a motivação e os objetivos do trabalho.
- Capítulo 2 Revisão Bibliográfica: Apresenta uma revisão bibliográfica do trabalho realizado na área do tema abordado.
- Capítulo 3 Camada Limite Planetária (CLP): Expõe uma breve revisão da camada limite planetária (CLP).
- Capítulo 4 Processos Difusivos Usuais e Anômalos: Esta seção apresenta um breve histórico da descoberta da difusão e os conceitos associados a ela, além de fornecer uma definição da difusão anômala e destacar suas principais características.
- Capítulo 5 Cálculo Fracionário: Esta seção aborda de forma sucinta a história do cálculo fracionário, desde seu surgimento até os dias atuais, além de abordar as definições clássicas das derivadas fracionárias não locais e suas propriedades mais importantes.
- Capítulo 6 Cálculo Diferencial e Integral Conformável: Neste tópico, é fornecida a definição da derivada conformável, segundo Khalil, juntamente com suas principais propriedades e as vantagens em relação às derivadas não locais.
- Capítulo 7 Soluções da Equação de advecção-difusão Conformável: Nesta seção, serão apresentadas duas abordagens diferentes para a resolução da equação de advecção-difusão fracionária bidimensional. Sendo uma trasiente e a outra estacionária.
- Capítulo 8 Validação dos Modelos: Esta seção apresenta os dados experimentais que servirão de base para a validação dos dados gerados pelas simulações dos modelos.

- Capítulo 9 Resultados : Nesta seção, são apresentadas simulações numéricas, comparações estatísticas com dados experimentais e análise da sensibilidade dos modelos. Além disso, também é discutido o número de pontos da quadratura de Gauss e convergência da solução, especificamente no caso do modelo transiente.
- **Capítulo 10 Conclusões**: Nesta seção, são apresentados o resumo dos principais resultados obtidos, seguido das conclusões e interpretações finais obtidas do presente estudo.

Revisão Bibliográfica

A equação de advecção-difusão tem uma importância fundamental na análise de modelos de dispersão de poluentes em diversos meios, tais como o ar, água e solo. Na área da qualidade do ar, essa equação é amplamente utilizada para calcular o campo de concentração de contaminantes na camada limite planetária (CLP). Essa equação é fundamental para descrever a dispersão de poluentes passivos em um meio turbulento e, de forma mais abrangente (PASQUILL; SMITH, 1983), é dada por :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} + w\frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial C}{\partial z}\right) + S^*, \quad (2.1)$$

onde t representa o tempo; x, y e z são as coordenadas espaciais (m); C é concentração média do contaminante passivo (g/m^3) ; u, v e w são os componentes do vento médio nas direções das coordenadas espaciais (m/s); S^{*} é termo fonte e K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulentos longitudinal, lateral e vertical (m^2/s) , respectivamente.

Embora a Eq. (2.1) ainda não tenha uma solução exata que inclua todos os seus parâmetros, vários estudos ao longo das décadas apresentaram soluções restritivas, utilizando algumas condições de contorno e expressões simples para a velocidade do vento e os coeficientes de difusão K como funções da altura z.

A primeira solução proposta para essa equação foi obtida por Fick no século XIX, usando o método Gaussiano (EVANGELISTA; LENZI, 2018). Nesta abordagem, o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são considerados constantes com a altura, e as condições de contorno para o fluxo de poluentes foram consideradas nulas para o limite inferior e superior da CLP, sendo essas condições comuns em soluções analíticas da equação de advecção-difusão.

Desde então, avanços significativos têm ocorrido na solução da equação de advecçãodifusão ao longo dos anos. Com o surgimento dos computadores e o desenvolvimento da computação algébrica no século XX, surgiram várias soluções numéricas e semi-analíticas. Dentre as soluções numéricas, destacam-se trabalhos como os de Brebbia & Brebbia (1983), Chock, Sun & Winkler (1996), Sharan, Kansa & Gupta (1997), Zienkiewicz, Taylor & Zhu (2000), Huebner *et al.* (2001), Rizza *et al.* (2003), Dang & Ehrhardt (2006), Ahmed (2012), Askari & Adibi (2017), entre outros. Por outro lado, os métodos semianalíticos são representados pelos trabalhos de Parlange (1971), Dyke (1964), Henry, Wang & Gebhart (1991), Cotta (1993), Cotta & Mikhailov (1997), Degrazia, Moreira & Vilhena (2001), Grisogono & Oerlemans (2001), Mangia *et al.* (2002), Moreira *et al.* (2005), Moreira *et al.* (2005), Moreira *et al.* (2005), Leite & Moreira (2016), Nascimento *et al.* (2018), entre outros.

Destaca-se, dentre os modelos semi-analíticos mencionados, a técnica GITT (Generalized

Integral Transform Technique) proposta por Cotta (1993) e Cotta & Mikhailov (1997). Essa técnica é uma derivação da Transformada Integral Clássica, descrita por Mikhailov & Ozisik (1984), e utilizada para solucionar Equações Diferenciais Parciais (EDPs) em problemas lineares de difusão. A GITT é baseada em uma transformação integral. Nesta transformação, a função que representa a concentração de poluentes é expandida em uma série composta por autofunções. Estas autofunções provêm da equação auxiliar, que é obtida a partir do problema de Sturm-Liouville, e são selecionadas de acordo com as condições de contorno do problema original. Após a expansão, integra-se na dimensão em que o problema foi expandido, aplicando-se a propriedade da ortogonalidade das autofunções da base utilizada. Este procedimento conduz a um sistema de equações diferenciais que pode ser resolvido numericamente por meio de pacotes de sub-rotinas numéricas. Finalmente, emprega-se a transformação integral inversa à solução obtida no espaço transformado para recuperar a solução no espaço original. A GITT gera apenas uma aproximação por meio do truncamento do somatório infinito em sua fórmula inversa, que é resultado da equação governante do problema original. Esse processo possibilita o controle automático do erro em função da ordem de truncamento desse somatório.

Há ainda, uma variedade de modelos operacionais de qualidade do ar que incorporam soluções semianalíticas, é o caso do modelo MSRED (*Model for Simulating Rocket Ef-fluent Dispersion*) (NASCIMENTO; MOREIRA; ALBUQUERQUE, 2017). Esse modelo é baseado no método ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*), projetado para simular a formação, elevação, expansão, estabilização e dispersão de nuvens de escape de foguete para avaliação de curto alcance. O MSRED foi concebido para ler os dados oriundos do modelo meteorológico WRF (*Weather Research and Forecasting*) e para preparar o campo de concentração de poluentes para modelagem de longo alcance através do modelo CMAQ (*Community Quality Multiscale Air Quality*). Além disso, Nascimento *et al.* (2018) aplicaram este sistema de modelagem para simular a dispersão dos contaminantes emitidos durante a explosão do foguete Falcon 9 na Estação da Força Aérea de Cabo Canaveral em 1 de setembro de 2016.

Embora as simulações computacionais sejam frequentemente utilizadas na simulação de processos atmosféricos, elas têm limitações em relação ao custo computacional, exigindo, muitas vezes, o uso de supercomputadores. Por outro lado, as soluções analíticas ou semi-analíticas podem representar esses processos com alta precisão e a um custo computacional relativamente baixo. Além disso, as soluções analíticas são capazes de representar explicitamente a influência dos parâmetros relacionados ao processo de dispersão dos contaminantes (CARVALHO; MOREIRA, 2007). Ademais, estudar e aprimorar essas soluções é essencial para desenvolver, validar, calibrar e aprimorar modelos numéricos. Uma extensa literatura está disponível sobre as soluções analíticas da equação de advecção-difusão de ordem inteira. Dentre os trabalhos mais relevantes, destacam-se as contribuições de Smith (1957), Scriven & Fisher (1975), Yeh & Huang (1975), Beryand (1976), Demuth (1978), Ulden (1978), Huang (1979), Nieuwstadt (1980), Tirabassi, Tagliazucca & Zannetti (1986), Tirabassi (1989), Ulden (1992), Chrysikopoulos, Hildemann & Roberts

(1992), Sharan *et al.* (1996), Huang (1999), Tirabassi (2003) e Sharan & Gopalakrishnan (2003), entre outros.

Em 2000, Wortmann, Moura & Vilhena (2000) propuseram um aprimoramento na técnica GITT, que permitiu obter a resolução analítica da equação de advecção-difusão unidimensional com coeficiente de difusão variável. A nova técnica, chamada GILTT, é uma extensão da GITT que utiliza a transformada de Laplace e o processo de diagonalização para resolver o sistema de equações diferenciais ordinárias geradas pela GITT. Uma das principais vantagens do método GILTT é a significativa redução do custo computacional em comparação à técnica anterior, visto que é um método totalmente analítico.

Na literatura, é possível encontrar uma grande quantidade de trabalhos que utilizam a GILTT para resolver a equação advecção-difusão em diferentes contextos. Tirabassi *et al.* obtiveram, em 2008, uma solução analítica aplicando a GILTT que descreve a deposição seca de contaminantes, levando em consideração as condições de contorno relacionadas à velocidade de deposição. Em 2016, foi obtida pela primeira vez a solução analítica para a equação de advecção-difusão-reação tridimensional transiente por Weymar, que combinou o método GILTT com o método da Decomposição de Adomian modificado. Esse estudo considerou a dispersão de um poluente secundário formado por uma reação fotoquímica, além de um segundo modelo para determinar o campo de concentração de um poluente que sofre perdas e ganhos devido à influência da radiação solar. Posteriomente, em 2017, Buske *et al.* apresentaram uma solução analítica via GILTT para a equação advecção-difusão, modelando o problema da dispersão de contaminantes em rios e canais em estado estacionário. Esse estudo considerou tanto os modelos tridimensionais quanto os bidimensionais.

A partir da segunda metade do século XX, houve um aumento expressivo nas pesquisas voltadas ao estudo e aplicação do cálculo fracionário. Esse interesse é, em grande parte, atribuído à sua capacidade de fornecer modelos mais precisos e sensíveis, principalmente para certos fenômenos cuja complexidade torna a modelagem convencional inadequada, como é o caso da difusão anômala. Embora sejam amplamente empregadas para descrever uma diversidade de fenômenos, as derivadas de ordem inteira apresentam limitações quando se trata de modelar processos que possuem propriedades de memória e hereditariedade (RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015). Por essa razão, o uso de derivadas fracionárias tem se tornado cada vez mais comum, uma vez que permitem uma descrição mais precisa desses processos.

Nos últimos anos, as derivadas fracionárias têm sido aplicadas de forma prática na modelagem da poluição do ar, como demonstrado em estudos realizados por Goulart *et al.* (2017), Moreira & Moret (2018), Acioli, Xavier & Moreira (2019), Xavier, Nascimento & Moreira (2019), Moreira & Santos (2019), Palmeira, Xavier & Moreira (2020), Soledade & Moreira (2022).

Goulart *et al.* (2017) foram os primeiros a considerar o uso de derivadas fracionárias na equação de advecção-difusão para resolver questões relacionadas à dispersão de poluentes atmosféricos. Embora inovadora, a solução proposta não levou em conta a falta de ho-

9

mogeneidade da turbulência na direção vertical, assumindo o coeficiente de difusão como constante. Já o trabalho de Moreira & Moret (2018) propôs um método que utiliza a GILTT modificada para resolver o problema transformado com uma derivada fracionária no termo advectivo. Além disso, a metodologia proposta permite aplicar uma parametrização para o perfil de vento mais realístico e também um coeficiente de difusão que considera a falta de homogeneidade da turbulência na direção vertical. Acioli, Xavier & Moreira (2019) propuseram uma solução utilizando os métodos de decomposição de Laplace (MDL) e da perturbação de homotopia (ADOMIAN, 1994; GHORBANI, 2009). Adicionalmente, no trabalho de Xavier, Nascimento & Moreira (2019), a mesma metodologia foi empregada, porém considerando um coeficiente de difusão vertical dependente da distância longitudinal da fonte com expoentes da mesma ordem da derivada fracionária $(K \propto x^{\alpha})$. Por sua vez, Moreira & Santos (2019) apresentaram uma equação de advecçãodifusão fracionária que descreve a formação de um poluente secundário (sulfato a partir do dióxido de enxofre) e considera os processos de remoção desse poluente da atmosfera. A solução desta equação é obtida através da transformada de Laplace, considerando uma camada limite planetária verticalmente não homogênea e utilizando o método ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method) proposto por Moreira & Vilhena (2009). Em 2020, Palmeira, Xavier Moreira propuseram uma solução analítica para a equação de advecção-difusão fracionária bidimensional, com um modelo evolutivo bi-fluxo, que é uma modificação da lei de Fick. Esse estudo também utiliza o método MDL para obter a solução analítica. É importante mencionar que todos esses trabalhos têm em comum o uso da derivada fracionária somente no termo advectivo, considerando a definição segundo Caputo (1966). Recentemente, Soledade & Moreira (2022) resolveram analiticamente a equação advecção-difusão fracionária bidimensional, combinando o método GILTT e derivadas conformáveis. Nesta abordagem, foram considerados parâmetros fracionários em todas as derivadas (termo difusivo e advectivo). Este procedimento permitiu considerar o comportamento anômalo no processo de difusão, resultando em uma nova metodologia que foi denominada α -GILTT.

Esta tese abre caminho para uma análise aprofundada do processo de dispersão de poluentes na atmosfera, levando em conta o comportamento anômalo observado no processo de difusão. Ela introduz uma abordagem inovadora para a resolução da equação de advecçãodifusão fracionária, introduzindo operadores fracionários e uma metodologia que emprega derivadas conformáveis. O diferencial desta abordagem reside na sua capacidade de resolver a equação bidimensional de advecção-difusão em ambos os regimes, estacionário e transiente, incorporando distintos parâmetros fracionários em todas as derivadas dessa equação. Esta metodologia inovadora tem potencial para transformar nosso entendimento da dispersão de poluentes na atmosférica.

Camada Limite Planetária (CLP)

A atmosfera é uma camada complexa e dinâmica que pode afetar a dispersão de contaminantes em todas as direções. Para desenvolver estratégias eficazes de prevenção e controle da poluição, é fundamental compreender profundamente os fenômenos associados, especialmente aqueles que ocorrem na camada limite planetária (CLP). Neste capítulo, a estrutura da atmosfera será estudada, com especial atenção à CLP. Além disso, será avaliada a influência de fatores, tais como as condições meteorológicas (regime dos ventos, radiação solar, estabilidade atmosférica, temperatura e umidade relativa) e a topografia do terreno, na dispersão dos poluentes.

3.1 Estrutura da atmosfera

A atmosfera é a camada gasosa que envolve a Terra, sendo a sua espessura correspondente a apenas 1% do raio terrestre, equivalendo a pouco mais de 60km. Ela é composta por uma mistura de gases, como nitrogênio, oxigênio, argônio, dióxido de carbono e outros (BARRY; CHORLEY, 2009). Além disso, é dividida em várias camadas, incluindo a Troposfera, Estratosfera, Mesosfera e Termosfera (STULL, 2012). No entanto, neste estudo, a atenção será voltada especificamente para a CLP, que é a seção mais próxima da superfície terrestre dentro da troposfera, variando entre 100 m e 3000 m de altitude. É nessa região que boa parte dos fenômenos climáticos ocorrem e onde a turbulência atmosférica é mais intensa. Compreender a dinâmica da CLP é fundamental para entender a dispersão de poluentes na atmosfera e, consequentemente, desenvolver estratégias efetivas de prevenção e controle da poluição do ar.

3.2 Camada Limite Planetária

A Camada Limite Planetária é uma região fundamental para a compreensão da dinâmica da atmosfera terrestre, especialmente para a dispersão de poluentes e a prevenção da poluição do ar. A CLP é a camada no interior da troposfera mais próxima da superfície terrestre, conforme ilustra a Figura 3.1. É nessa região que ocorrem a maioria dos fenômenos climáticos e onde a turbulência atmosférica é mais acentuada.





Fonte: (STULL, 1988) adaptada

A CLP é diretamente influenciada pela superfície terrestre e responde aos forçantes superficiais, tais como o cisalhamento do vento, os fluxos de umidade e calor, a emissão de poluentes e os efeitos da topografia. A ação dessas forças superficiais sobre a CLP causa a ascensão de massas de ar provenientes do solo, motivada por um gradiente positivo de temperatura entre a superfície e o ar. Essas massas de ar são também referidas como termas, turbilhões ou vórtices, e contribuem para a geração de turbulência na camada limite. Essa turbulência é composta por redemoinhos de diferentes tamanhos, sobrepostos uns aos outros, e as intensidades relativas desses vórtices de tamanhos distintos definem o espectro da turbulência.

Uma das características mais importantes da CLP é a variação de temperatura durante o dia. Essa variação não ocorre estritamente devido à ação direta da radiação solar sobre a camada limite, mas sim devido aos processos de transporte de calor provocados pela absorção da radiação solar pela superfície terrestre. O solo absorve aproximadamente 90%da radiação solar, experimentando variações térmicas em resposta a essa influência radiante. Essas variações de temperatura, por sua vez, desencadeiam mudanças na camada limite por meio de processos de transporte. Durante o dia, a superfície aquece a camada de ar imediatamente adjacente por condução, e esta, por convecção, aquece a CLP, resultando em um fluxo positivo de calor. No entanto, à noite, o solo perde calor e passa a receber calor da atmosfera, resultando em um fluxo negativo. Assim, o contato direto entre a CLP e o solo resulta em troca de calor e no atrito viscoso devido à superfície, tornando o escoamento da CLP tipicamente turbulento. É possível afirmar, portanto, que a turbulência está intimamente ligada ao fluxo vertical de calor, sendo um fator crucial para o transporte de massa, calor e momento na CLP. Nesse sentido, a turbulência se torna muito mais eficaz na dispersão de poluentes do que a simples difusão molecular. Além da altura, outro parâmetro importante na CLP é o seu topo, que é definido como

o ponto onde o ar da camada limite e o da troposfera livre se encontram em proporções

idênticas (BAARS *et al.*, 2008). A altura da CLP pode variar entre 100 m e 3000 m, dependendo das influências das forças citadas anteriormente, que ocorrem por meio de mecanismos de transferência turbulenta (STULL, 2012).

A altura de CLP é essencial para a compreensão de vários processos na troposfera, incluindo a distribuição de aerossóis, a atividade convectiva, a formação de nuvens, a determinação da capacidade de dispersão de poluentes e muito mais. Por essa razão, a altura da CLP é um importante dado de entrada para os modelos atmosféricos.

A altura da CLP depende da pressão atmosférica, de modo que em áreas de alta pressão a CLP é mais estreita do que em regiões de baixa pressão, tanto sobre o continente quanto sobre o oceano (NUNES, 2008). Isso se deve à subsidência do ar e ao movimento divergente em baixos níveis, que fazem com que a altura da camada limite seja reduzida. Em regiões de baixa pressão, é difícil estabelecer o topo da CLP, então a base das nuvens é frequentemente usada como referência. Em contrapartida, em regiões de alta pressão, a CLP é mais claramente definida, especialmente sobre o continente (STULL, 2012).

Neste sentido, a CLP possuirá características bem diferentes de acordo com o fluxo de calor sensível a que ela estiver exposta. Logo, é possível classificá-la em três tipos principais:

3.2.1 Camada Limite Convectiva (CLC)

A Camada Limite Convectiva (CLC) é caracterizada por uma forte mistura vertical, que se origina do fluxo de calor turbulento positivo gerado pelo aquecimento da superfície terrestre pela radiação solar. Esse processo de formação começa com o nascer do sol, quando a radiação solar penetra na atmosfera e aquece a superfície terrestre, gerando correntes de ar quente que sobem por convecção. Enquanto isso, o ar frio e denso, localizado acima, desce, criando um movimento contínuo na CLC. A CLC atinge o seu ápice entre as 12 e 14 horas, momento em que sua altitude pode atingir entre 1000 e 2000 metros. Com o pôr do sol, o fluxo de calor se torna negativo e a CLC cessa (ISNARD, 2004). Essa camada é de extrema importância para a dispersão de poluentes, pois é responsável pela verticalização e transporte de massa e energia na atmosfera.

A Camada Limite Convectiva pode ser dividida em três subcamadas distintas. A primeira delas é a Camada Superficial, cuja principal característica é a forte interação entre a atmosfera subjacente e a superfície da Terra. Esta camada é profundamente influenciada por processos que ocorrem na superfície, tais como radiação solar, evaporação e rugosidade do terreno. A segunda é a Camada de Mistura, cuja principal característica é a turbulência bem desenvolvida, resultante principalmente do aquecimento diferencial da superfície da Terra pelo sol. Esse processo leva à homogeneização das propriedades físicas e químicas do ar. E, por fim, a Camada de Entranhamento, que está localizada no topo da camada limite convectiva, e é caracterizada pela variação do gradiente de temperatura de forma que a temperatura aumenta com a altitude, em vez de diminuir. Essas subcamadas são

importantes para entender os processos de transporte e dispersão de poluentes na CLC, conforme será visto a seguir:

3.2.1.1 Camada Superficial (CS)

É o trecho da CLC que é intensamente afetada pela interação com o solo. Por isso, é marcada pela influência de processos superficiais, como aquecimento solar, evaporação e arrasto decorrente das características da superfície. Esta camada apresenta um fluxo turbulento quase constante, com elevados gradientes de temperatura e velocidade tangencial. Essa camada representa a parte mais baixa da CLP e sua profundidade pode variar de apenas alguns metros a algumas dezenas de metros, dependendo das condições. Para fins práticos, sua espessura corresponde a cerca de 10% da altura da CLP. Essa região é de extrema importância para estudos experimentais, pois é por meio dela que as torres micrometeorológicas coletam dados que possibilitaram a formulação da Teoria da Similaridade de Monin-Obukhov. Essa teoria é fundamental para a modelagem da baixa atmosfera e a parametrização de propriedades de escoamento, permitindo o entendimento do comportamento dos ventos e da temperatura na camada superficial, onde a magnitude dos fluxos turbulentos varia em menos de 10%.

O comprimento de Obukhov é um importante parâmetro para a avaliação das condições de estabilidade atmosférica na camada superficial. Sua determinação é realizada através da Eq. (3.1) e permite estimar a altura em que os efeitos da turbulência convectiva tornam-se mais relevantes em relação aos efeitos da turbulência mecânica. Esse parâmetro desempenha um papel importante na compreensão da dinâmica da camada limite planetária e na modelagem de processos atmosféricos, como o transporte de massa e energia (STULL, 2012).

$$L = \frac{-u_*^3}{k_{T_o}^{g}\left(\overline{w'T'}\right)} \tag{3.1}$$

Na Eq. (3.1), L representa o comprimento de Obukhov, k é a constante de von Kàrmàm, g é a aceleração da gravidade, T_0 é a temperatura potencial média, u_* a velocidade de fricção na superfície e $\left(\overline{w'T'}\right)$ o fluxo de calor sensível turbulento na superfície. O comprimento de Obukhov é utilizado para definir o parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov, que é calculado por meio da equação $\xi = h/L$, onde h representa a altura da CLP. Ele é descrito como um "parâmetro de escala da camada superficial" (STULL, 2012)

e, de acordo com Panofsky (1984 apud MELLO, 2006), a CLC é considerada bem desenvolvida para valores de |L| compreendidos no intervalo de 10 a 100 metros. A partir do parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov, é possível determinar se o experimento analisado é de convecção fraca, moderada ou alta, conforme a Tabela 3.1.

	-	
Experimento	Parâmetro de Monin-Obukhov	
Convecção fraca	$ \xi < 5$	
Convecção moderada	$5 < \xi < 10$	
Convecção alta	$ \xi > 10$	
Fonte: (MELLO, 2006)		

Tabela 3.1: Parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov

3.2.1.2 Camada de Mistura (CM):

A camada de mistura (CM) é uma região atmosférica localizada no intervalo de 0, 1h < 1z < h, abrangendo uma considerável parte da Camada Limite Convectiva (CLC). Nessa região, ocorre uma intensa mistura vertical de calor, umidade e momento, resultando em uma turbulência uniforme ao longo de toda a extensão vertical, sendo pouco sensível aos parâmetros $z \in u_*$. Geralmente, a turbulência nessa camada é conduzida por convecção, embora seja possível a formação de uma camada quase totalmente misturada em áreas de ventos fortes. As fontes convectivas incluem a transferência de calor do solo aquecido e o resfriamento radiativo do topo da camada de nuvens. Na primeira situação, ocorrem térmicas de ar quente subindo do solo, enquanto na segunda, ocorrem térmicas de ar frio descendo do topo das nuvens. Ambas podem ocorrer simultaneamente, especialmente quando uma CM de estratocúmulos frios está sendo advectada sobre um solo mais quente (STULL, 2012). Até mesmo a velocidade e direção do vento são aproximadamente constantes com z (STULL, 2012). De acordo com os modelos numéricos propostos por Deardorff (1972), observações de campo realizadas por Kaimal et al. (1976) e experimentos de laboratórios realizados por Willis & Deardorff (1976) concluiu-se que as medidas mais relevantes na caracterização da CM são a altura da CLP (h) e a escala de velocidade convectiva (w_*) , cujo valor é dado pela equação:

$$w_* = \left[\frac{g}{T_0} \left(\overline{w'T'}\right)h\right]^{1/3} \tag{3.2}$$

Assim, as velocidades turbulentas são proporcionais a w_* , e as medidas dos grandes turbilhões convectivos são função de h. Segundo Weil & Brower (1984), valores habituais para $h e w_*$ são 1000 a 2000 m e 2 m/s, respectivamente. Logo, o intervalo de tempo para o ar circular entre a superfície e o topo da CM é da ordem de 10 a 20 minutos na maioria dos contextos. Esse tempo, denominado escala de tempo convectiva, é obtido através da expressão h/w_* . Assim, mudanças no fluxo de calor da superfície e outras forçantes de superfície podem ser comunicadas ao resto da CM em um tempo relativamente curto, de aproximadamente 15 minutos.

3.2.1.3 Camada interfacial ou zona de entranhamento (ZE)

A camada interfacial, também conhecida como zona de entranhamento, abrange a região que vai 0, 8h a 1, 2h. Essa camada pode ser bastante espessa devido ao processo de entranhamento, e aproximadamente 40% de sua profundidade equivale à camada de mistura. Essa região é caracterizada pela grande estabilidade atmosférica e por uma inversão no perfil de temperatura em seu topo, que funciona como uma barreira para as correntes ascendentes e é estática do ponto de vista da circulação do ar. Durante o dia, a turbulência nessa região é intermitente, dominada principalmente pelo efeito de entranhamento. À noite, a atividade turbulenta diminui devido à falta de irradiação solar sobre a superfície terrestre, e a zona de entranhamento passa a ser denominada camada de inversão. De acordo com Davis *et al.* (1997), a zona de entranhamento pode variar amplamente durante o dia, o que torna difícil a medição de suas características e, portanto, a parametrização dessa região em modelos de crescimento da camada limite é mais primitiva do que a parametrização da camada superficial.

3.2.2 Camada Limite Estável (CLE)

A Camada Limite Estável (CLE) representa uma região específica na atmosfera caracterizada por uma estabilidade vertical acentuada. Nesse contexto, a estabilidade vertical refere-se à condição em que camadas de ar mais quentes estão situadas acima de camadas mais frias, inibindo, assim, a ascensão vertical do ar. Um dos indicadores frequentemente observados na CLE é a presença de inversões térmicas, onde a temperatura do ar aumenta com a altitude em vez de diminuir.

Essa estabilidade na CLE resulta em limitações na mistura vertical de ar, ou seja, a capacidade de diferentes camadas de ar se misturarem verticalmente é restrita. Isso tem implicações significativas na dispersão de poluentes atmosféricos, uma vez que a mistura vertical limitada pode levar à acumulação de poluentes próximos à superfície (STULL, 2012). A emissão de fumaça na atmosfera estável se espalha horizontalmente com pouca dispersão vertical, exceto por oscilações semelhantes a ondas, conforme ilustra a Figura 3.2.

Durante a noite, a CLE é frequentemente mais evidente, especialmente quando a superfície da Terra perde calor para o espaço, resfriando a camada de ar próxima à superfície. Esse resfriamento noturno pode contribuir para a formação de inversões térmicas e, consequentemente, para a estabilização da atmosfera.

3.2.3 Camada Residual (CR)

A camada residual (CR) é uma camada de ar que se forma cerca de meia hora antes do pôr do sol, quando as térmicas deixam de se formar e a turbulência da camada mista decai. Essa camada é chamada de residual porque suas variáveis médias e de concentração são as mesmas da camada mista que decaiu recentemente. A CR é neutramente estratificada, resultando em turbulência quase igual em todas as direções. Durante a noite, as emissões de fumaça na CR tendem a se dispersar em taxas iguais na vertical e horizontal, criando uma pluma em forma de cone, conforme ilustra a Figura 3.2. Poluentes não passivos



Figura 3.2: Comportamento de uma pluma dispersada na CR e outra na CLE Fonte: (STULL, 1988) adaptado

podem reagir com outros componentes durante a noite para criar compostos que não foram originalmente emitidos do solo. Às vezes, produtos químicos gasosos podem reagir para formar aerossóis ou particulados que podem precipitar. A CR geralmente existe por um tempo pela manhã antes de ser misturada na nova camada mista. Durante esse tempo, a radiação solar pode desencadear reações fotoquímicas entre os constituintes na CR. A CR não tem contato direto com o solo e é afetada pela espessura da camada noturna estável que se forma abaixo dela. Como resultado, a camada residual não é afetada pelo transporte turbulento de propriedades relacionadas à superfície e não se enquadra na definição de uma camada limite. Variáveis como a temperatura potencial virtual diminuem lentamente durante a noite na CR.

3.2.4 Camada Noturna (CN)

A Camada Noturna (CN), também chamada de Camada Limite Estável, é uma subcamada da atmosfera que se forma predominantemente durante a noite ou em situações de resfriamento radiativo. Isso acontece devido à troca de calor entre a Camada Residual e o solo. A superfície terrestre tem um calor específico baixo, o que faz com que ela se resfrie rapidamente, tornando-se mais fria do que a atmosfera adjacente. Assim, em noites de céu
limpo e com ventos fracos, a porção inferior da recém-formada Camada Residual é alterada pelo contato com o solo (experienciando um fluxo de calor negativo), convertendo-se progressivamente na Camada Noturna. Segundo Stull (2012), a CN é caracterizada por um ar estaticamente estável com turbulência mais fraca. Assim, a turbulência ocorre às vezes em rajadas relativamente curtas que podem causar mistura na CN. Segundo, Panofsky (1984), a turbulência existente nessa camada é essencialmente mecânica e sua existência se deve ao calor não suprimido pelo fluxo negativo. Durante os períodos não turbulentos, o fluxo torna-se essencialmente desacoplado da superfície. Um valor habitual para a espessura (z) da CN é de 100m.

3.3 Evolução temporal da Camada Limite planetária

Segundo Stull (2012), a camada limite sofre uma evolução diurna distintamente estruturada quando influenciada por um sistema de alta pressão, como pode ser visto na Figura 3.3. Cerca de meia hora após o nascer do sol, a superfície terrestre começa a aquecer, dando início à formação da Camada de Mistura (CM). A CM é caracterizada por uma intensa mistura em sua parte interna, indicando a presença de turbulência gerada pela convecção, que por sua vez transporta calor e umidade da superfície para a atmosfera. Acima da CM, é formada uma camada estável chamada de zona de entranhamento (ZE), a qual age como uma cobertura para correntes ascendentes, restringindo, portanto, a turbulência dominante. Essa camada atua como uma interface entre a atmosfera livre e a CLP e geralmente não ultrapassa 2,0 km. Ao longo do dia, a CM sofre um aumento de profundidade, atingindo o seu pico às 15 horas. Além disso, é possível observar, logo abaixo da CM, uma camada contínua sobre a superfície terrestre, conhecida como camada superficial (CS), que permanece durante toda a evolução temporal da CLP.

Após meia hora do pôr do sol, inicia-se a formação da camada Residual (CR), que se caracteriza pela diminuição do fluxo de calor da superfície e pela diminuição da convecção. Durante a noite, a parte inferior da CR transforma-se na camada Noturna (CN). A CR permanece durante a manhã até ser incorporada em uma nova camada de mistura (CM).

Durante a noite, a Camada Limite Planetária (CLP) é limitada verticalmente pela camada de inversão (CI), que age como interface entre a atmosfera livre e a CLP. Nessa região, a mistura não é intensa e a turbulência diminui com a altura devido à alta estabilidade. Em noites de céu claro, a camada de inversão pode atingir uma altura média de 300 metros. Em condições atmosféricas estáveis, essa camada impede a saída de poluentes da CLP. Com o nascer do sol e o aquecimento da superfície terrestre, a temperatura do ar próximo ao solo aumenta e o processo descrito se repete, dia após dia, enquanto o tempo permanecer bom (WALLACE; HOBBS, 2006).



Figura 3.3: Evolução temporal da CLP.

Fonte: (STULL, 1988) adaptado

3.4 Turbulência

A turbulência é um fenômeno de instabilidade fluido-dinâmica que se caracteriza pela ocorrência de flutuações caóticas e irregulares nas propriedades do escoamento. Essas flutuações podem afetar a velocidade, pressão e densidade do fluido, e podem resultar em mistura, transporte de massa e transferência de calor (TENNEKES et al., 1972). Esses movimentos podem ocorrer em diferentes escalas de tempo e espaco, desde pequenas turbulências no interior de um tubo até grandes turbulências atmosféricas em escala global. Os estudos sobre turbulência tiveram início no final do século XIX, em 1883, com o físico e engenheiro britânico Osborne Reynolds. Ele conduziu um importante experimento com o intuito de investigar os diferentes regimes de escoamento no interior de tubos, visando compreender as transições que ocorrem entre os fluxos laminar e turbulento. Para sua pesquisa, Reynolds utilizou um tubo de vidro transparente de seção reta uniforme conectado a um reservatório contendo água. Para visualizar o escoamento no seu interior, um fluido colorido foi injetado na entrada do tubo. Em seguida, Reynolds variou o fluxo de água (e, portanto, a velocidade do escoamento) ajustando a altura do reservatório ou usando uma válvula. Através desse procedimento, ele conseguiu obter diferentes velocidades de escoamento no tubo, permitindo que o padrão de escoamento fosse facilmente observado. Com as alterações na velocidade do fluido, oscilações surgiam, causando a completa mistura do corante com a água. Este movimento que provoca a mistura, chamado turbulência, é responsável pela transferência de quantidade de movimento e de massa na direção transversal do escoamento. O experimento permitiu que Reynolds identificasse dois padrões distintos de escoamento: laminar e turbulento (MÔLLER; SILVESTRINI, 2004).

O escoamento laminar é caracterizado por um fluxo suave e regular, no qual as partículas do fluido se movem em camadas paralelas sem se misturar, seguindo um padrão bem definido e previsível. Esse tipo de fluxo ocorre em sistemas com baixa velocidade e/ou viscosidade do fluido, onde a força viscosa dominante evita a formação de turbulência. Por outro lado, o escoamento turbulento é caracterizado por um fluxo caótico e irregular, em que as partículas do fluido se misturam e se deslocam em diversas direções, formando vórtices e redemoinhos. Esse tipo de fluxo ocorre em sistemas com alta velocidade e/ou viscosidade do fluido, onde a força inercial domina a força viscosa, levando à formação de turbulência. O número de Reynolds (R_e) é um parâmetro adimensional usado na mecânica dos fluidos para determinar a transição entre os regimes de escoamento laminar e turbulento, levando em consideração o diâmetro do tubo (D_T), a viscosidade dinâmica (μ), a massa específica do fluido (ρ) e a velocidade do fluido (V). Ele é obtido através da fórmula:

$$R_e = \frac{\rho.V.D_T}{\mu} \tag{3.3}$$

A Tabela 3.2 apresenta os regimes de escoamento em um tubo cilíndrico para diferentes valores do número de Reynolds, para a maioria das condições práticas.

Regime de escoamento	Número de Reynolds
Laminar	$R_{\rm e} < 2300$
Transição	$2300 < R_e < 4000$
Turbulento	$R_e > 4000$
Fonte: (CENGEL; CIMBALA, 2015)	

Tabela 3.2: Regime de escoamento de Reynolds em dutos cilíndricos

Quando um escoamento é considerado no interior da CLP, o número de Reynolds pode ser calculado utilizando-se a equação:

$$R_e = \frac{\overline{u}l_c}{\varsigma} \tag{3.4}$$

onde \overline{u} é a velocidade característica do escoamento, l_c é a dimensão característica do problema e ς é a viscosidade cinemática do fluido. A velocidade característica pode ser obtida através de medições experimentais ou simulações numéricas, enquanto a dimensão característica na CLP pode ser a espessura da camada limite, que é a região onde o escoamento é influenciado pela fricção com a superfície terrestre (SCHETZ; BOWERSOX, 2011).

É importante lembrar que a transição do escoamento laminar para o turbulento na camada limite planetária é influenciada por diversos fatores, além do número de Reynolds, como a rugosidade da superfície e as condições de instabilidade da camada limite.

3.4.1 Turbulência na Camada Limite Planetária (CLP)

A atmosfera é um ambiente altamente dinâmico e complexo, influenciado por diversos fatores que afetam o comportamento do escoamento do ar. Isso resulta em turbulências e mudanças notáveis nas propriedades físicas do fluido. Nos níveis mais baixos da atmosfera, a turbulência desempenha um papel crucial, aumentando a resistência ao escoamento e, paradoxalmente, reduzindo o arrasto em locais de separação da camada limite. A turbulência pode ser induzida por correntes térmicas ou convectivas, variações no relevo, diferenças na velocidade do vento em uma zona frontal, ou mudanças na temperatura e pressão.

A superfície terrestre é um dos principais fatores que contribuem para a instabilidade do escoamento do ar, gerando grandes variações verticais na velocidade do vento e aquecimento por radiação solar durante o dia. Isso é particularmente evidente na camada limite planetária convectiva, onde as estruturas turbulentas são compostas por regiões com movimento vertical descendente de ar mais frio (*downdrafts*) e regiões com movimento vertical ascendente de ar quente (*updrafts*) (MARQUES FILHO, 2004).

De acordo com a lei de conservação de massa, o ar quente que sobe possui uma velocidade superior ao do ar frio que desce, resultando em uma assimetria na CLP. Essas estruturas assimétricas são responsáveis pela dispersão vertical de contaminantes, distinguindo-se dos padrões habituais gaussianos (LAMB, 1984). O campo instantâneo de flutuações da componente vertical de velocidade w' e da temperatura potencial θ' permite identificar a formação dos *updrafts* bem definidos, que se desenvolvem a partir da união de pequenas plumas geradas próximas à superfície.

Os *updrafts* contribuem significativamente para os fluxos verticais de calor e de momento, se comparados aos *downdrafts*. Após alcançar a camada de entranhamento, os *updrafts* espalham-se lateralmente e retornam em direção à superfície através de movimentos verticais descendentes, existentes em boa parte da CLP. Esse processo de entranhamento gera flutuações positivas de temperatura potencial nas adjacências da CLP, onde é possível observar uma zona de penetração de ar potencialmente quente e limpo na CLP (KAIMAL *et al.*, 1976).

A Figura 3.4 ilustra o campo tridimensional instantâneo de velocidade vertical em conjunto com cortes verticais e horizontais, onde as flutuações positivas mais intensas de $w* (2, 5m/s \le w* \le 6, 0m/s)$ estão indicadas de vermelho, assim de acordo com essa ilustração, as velocidades verticais das termas podem alcançar até 6 m/s e as *updrafts*, representadas pelos tons de azul, variam de 1 a 2 m/s. A compreensão dessas estruturas turbulentas é importante para diversas aplicações, como a previsão do tempo e a dispersão de poluentes. Além disso, a ilustração oferece uma visão nítida da assimetria nas estruturas verticais da CLP convectiva (MARQUES FILHO, 2004).



Figura 3.4: Campo tridimensional instantâneo de velocidade vertical em conjunto com cortes verticais e horizontais

Fonte: (MARQUES FILHO, 2004)

Processos Difusivos Usuais e Anômalos

Neste capítulo, serão explorados os conceitos de difusão usual e difusão anômala, contextualizando-os historicamente. Adicionalmente, será discutida a relação entre as derivadas fracionárias e a difusão anômala. Esta perspectiva oferece uma visão mais ampla da aplicação do cálculo fracionário na representação dos processos difusivos, integrando o comportamento não markoviano à discussão.

4.1 Difusão Usual

A descoberta da difusão remonta ao século XIX, quando o botânico escocês Robert Brown observou o movimento aleatório e contínuo de partículas de pólen suspensas em um líquido. Antes mesmo dele, um registro fascinante desse fenômeno já havia sido feito pelo poeta romano Titus Lucretius Carus, que viveu no século I a.C. Em seu poema "De rerum natura,"¹ Títus descreveu poeticamente o comportamento caótico das partículas de poeira em uma sala escura, quando inundados por um feixe de luz solar (EVANGELISTA; LENZI, 2018). Essa descrição, presente em seu poema "De rerum natura", sugeria a existência de partículas ainda menores (átomos) e poderia ser considerada uma evidência do fenômeno posteriormente descrito por Brown.

Esse movimento aleatório recebeu posteriormente o nome de "movimento browniano" e foi compreendido como o resultado das inúmeras colisões das moléculas do fluido com as partículas de pólen. Essas colisões impulsionavam as partículas em diversas direções, gerando o movimento estocástico que Brown havia observado. A compreensão do movimento browniano foi um marco significativo na história da ciência, pois revelou a natureza molecular da matéria (PHILIBERT, 2006).

No entanto, naquela época, a comunidade científica ainda não estava plenamente convencida da existência dos átomos e moléculas como constituintes de um fluido. Diversas hipóteses surgiram para refutar essa ideia. Uma delas sugeria que o movimento observado por Brown poderia ser provocado pela presença de organismos vivos, no entanto, o próprio Brown descartou essa hipótese. Ele percebeu que esse padrão ocorria tanto nos grãos de pólen frescos quanto nos secos. As experiências realizadas por Brown com substâncias orgânicas e inorgânicas, pulverizadas e suspensas em água, revelaram que esse movimento é uma característica comum da matéria nesse estado. Em 1828, ele publicou esses resultados em um artigo intitulado "Um breve relato de observações microscópicas" (BROWN, 1828).

Paralelamente, surgiram outras teorias para explicar o movimento browniano, como gra-

¹Sobre a Natureza das Coisas (Tradução nossa)

dientes de temperatura, perturbações mecânicas, efeitos de capilaridade e a presença de correntes de convecção, entre outras. No entanto, mais tarde, Georges Gouy (1854-1926) realizaria uma investigação mais cuidadosa do movimento browniano, através de uma série de experimentos com diferentes tipos de partículas em diferentes tipos de fluidos, ele concluiria que esse movimento é independente de forças externas (como vibrações, luz, magnetismo, gradiente de temperatura) e é mais intenso em fluidos de menor viscosidade (PHILIBERT, 2006).

Embora Brown tenha sido capaz de evidenciar a existência do movimento browniano, ele não conseguiu descrevê-lo matematicamente. Foi somente no início do século XX que cientistas como Einstein (1905), Smoluchowski (1906) e Paul Langevin (1908) desenvolveram, de forma independente, uma teoria quantitativa para o movimento translacional browniano, demonstrando assim a existência dos átomos. Além disso, essas pesquisas permitiram determinar o Número de Avogadro, um valor fundamental para a compreensão mais aprofundada da natureza atômica e molecular da matéria.

4.1.1 O movimento Browniano segundo Einstein

A primeira explicação satisfatória para o movimento Browniano foi proposta por Einstein em seu artigo intitulado "Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen."² Nesse trabalho, ele descreveu sua teoria de difusão de pequenas esferas em suspensão, considerando partículas dispersas de forma irregular em um líquido em estado de equilíbrio dinâmico. Essas partículas eram influenciadas apenas por uma força F^* que depende da posição. Por simplicidade, Einstein considerou o caso unidimensional.

O grande "insight" de Einstein foi aplicar as leis das moléculas solutas a partículas maiores em suspensão em um líquido. Ele propôs uma derivação que, embora não seja um modelo rigoroso, apresenta uma suposição fundamental: equilibrar a pressão osmótica causada pelos solutos com a força de arrasto resultante da viscosidade do solvente (EINSTEIN, 1905). Dessa forma, para um estado estacionário, assumindo que a variação da energia livre é nula em um comprimento infinitesimal δx , Einstein encontrou a relação para o coeficiente de difusão, K_c , dado por:

$$K_c = \frac{RT_f}{N^*} \frac{1}{3\pi \bar{\eta}\sigma} \tag{4.1}$$

onde R representa a constante dos gases ideais, N^* o número de Avogadro, $\overline{\eta}$ a viscosidade do solvente, T_f é temperatura e σ o raio das partículas suspensas. Assim, Einstein demonstra que o coeficiente de difusão depende apenas da viscosidade do líquido e do tamanho das partículas suspensas (com exceção das constantes universais e da temperatura

²Sobre o movimento de partículas suspensas em um líquido em equilíbrio, como requerido pela teoria cinética molecular do calor (Tradução nossa)

absoluta).

Em uma etapa subsequente, Einstein estabelece uma relação entre o movimento irregular das partículas suspensas em um líquido e a difusão, reconhecendo que esses movimentos irregulares são resultantes do movimento térmico das moléculas. Ele descreveu as posições sucessivas de uma partícula em intervalos de tempo t, assumindo que o movimento dela é independente do movimento de todas as outras partículas e que t é pequeno o suficiente para que os movimentos de uma única partícula em dois intervalos de tempo t consecutivos possam ser considerados mutuamente independentes. Esses são os dois pressupostos fundamentais do "movimento browniano".

Assumindo que o deslocamento Δ das partículas em um determinado tempo ao longo de uma direção específica segue uma função de distribuição simétrica $f(\Delta)$ (que, na verdade, é uma distribuição gaussiana para tempos suficientemente longos, pois pode ser facilmente derivada sem novas suposições) (EINSTEIN, 1905), Einstein deduz uma equação para a distribuição espacial das partículas, que corresponde à segunda lei de Fick . Essa equação permite definir a difusividade em um nível microscópico, e é expressa por

$$K_c = \frac{1}{2t} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta^2 f(\Delta) d\Delta = \frac{1}{2t} \left\langle \Delta^2 \right\rangle$$
(4.2)

Portanto, o desvio quadrático médio dos deslocamentos é proporcional ao coeficiente de difusão e apresenta um comportamento linear em relação ao tempo, ou seja

$$\left\langle \Delta^2 \right\rangle = 2K_c t = \frac{RT_f}{N^*} \frac{1}{3\pi \overline{\eta}\rho} t \tag{4.3}$$

Essa expressão oferece um método para determinar o número de Avogadro, já que o deslocamento quadrático médio $\langle \Delta^2 \rangle$ e o tempo t podem ser medidos e os valores T_0 , $\overline{\eta} \in \rho$ podem ser determinados de forma experimental.

Baseado nas hipóteses mencionadas, onde as partículas se movem de forma independente e seus movimentos em diferentes intervalos de tempo são processos mutuamente independentes, ou seja, o sistema não teria efeito de memória. Einstein apresenta uma nova dedução da equação de difusão, originalmente formulada por Adolf Fick, expressa por

$$\frac{\partial\nu(x,t)}{\partial t} = K_c \frac{\partial^2\nu(x,t)}{\partial x^2} \tag{4.4}$$

onde $\nu(x,t)$ é número de partículas por unidade de volume no instante de tempo t e posição x.

Essa contribuição de Einstein antecipa, portanto, a relação Chapman-Kolmogorov e as teorias modernas de cadeias markovianas (PAIS, 1995). Einstein também aponta que a solução da equação de difusão (4.4), com condições iniciais apropriadas, é dada pela forma Gaussiana

$$\nu(x,t) = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi K_c t}} exp\left[-\frac{x^2}{4K_c t}\right]$$
(4.5)

onde N_0 representa a função $\nu(x,t)$ normalizada, expressa por

$$N_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \nu(x, t) dx \tag{4.6}$$

A contribuição de Einstein foi de extrema importância para a compreensão do movimento browniano e para a validação da teoria atômica. Suas formulações matemáticas estabeleceram relações entre a temperatura, viscosidade do fluido e as propriedades das partículas em movimento, permitindo a quantificação e previsão do comportamento do movimento browniano. Essas descobertas tiveram um impacto significativo no campo da física e abriram caminho para avanços subsequentes no estudo da dinâmica molecular e da termodinâmica estatística.

Posteriormente, Langevin realizou um estudo mais minucioso sobre o movimento browniano, considerando agora os aspectos microscópicos do sistema, fazendo com que a difusão pudesse ser exibida em termos de elementos já conhecidos pela teoria cinética dos gases.

4.1.2 O movimento browniano segundo Langevin

Em 1908, Paul Langevin publicou um trabalho intitulado "Sur la théorie du mouvement brownien," ³ no qual apresentou uma abordagem diferente da de Einstein e Smoluchowski para descrever o movimento browniano. Langevin utilizou os princípios básicos da mecânica clássica e da mecânica estatística em seu estudo. Ele propôs que uma partícula em movimento browniano é influenciada por duas forças distintas. A primeira é uma força dissipativa, semelhante a um amortecimento, que é proporcional à velocidade da partícula. A segunda força é aleatória, originando-se das contínuas colisões com as moléculas do meio, de modo que sua média temporal é zero, isto é, $\langle F_a(t) \rangle = 0$. Com base nessas forças, Langevin aplicou a segunda lei de Newton a uma partícula browniana de massa m(LANGEVIN, 1908), resultando na seguinte equação de movimento:

$$m\frac{dv}{dt} = \alpha_c v + F_a(t), \tag{4.7}$$

onde α_c representa o coeficiente de fricção, relacionado com a viscosidade do meio e $F_a(t)$ é a força aleatória proveniente das colisões. Ao integrar a Eq. (4.7) e realizar a média temporal, levando em consideração a relação $(1/2)m \langle v^2 \rangle = (1/2)k_BT_f$, em que k_B é a constante de Boltzmann, Langevin obteve o seguinte resultado:

$$\left\langle \Delta^2(t) \right\rangle = \left(\frac{RT_f}{N^*}\right) \left(\frac{1}{3\pi\overline{\eta}\rho}\right) t,$$
(4.8)

Neste ponto, é importante destacar que a Eq. (4.8) evidencia que o deslocamento quadrático médio é proporcional ao tempo, o que é uma característica típica da difusão comum.

³Sobre a teoria do movimento browniano (Tradução nossa)

Esse resultado é equivalente ao que Einstein obteve em seu estudo sobre o movimento Browniano. Além disso, Langevin apresenta uma explicação mais simples para o fenômeno do movimento Browniano. Ele parte do teorema da equipartição de energia e da segunda lei de Newton, considerando um sistema mais realista ao levar em conta a força de arrasto e a força aleatória resultante das colisões entre as partículas e as moléculas do fluido.

A compreensão do movimento browniano por Einstein e Langevin trouxe avanços significativos para o entendimento da difusão, com impacto não apenas na física, mas também em diversas áreas das ciências. Uma das implicações mais marcantes desse estudo foi a confirmação direta da existência de átomos e moléculas, aspecto que, até então, era questionado por muitos cientistas da época. Além disso, Einstein e Langevin ofereceram uma descrição quantitativa do movimento browniano, apresentando equações matemáticas que descreviam a forma como as partículas se difundem em um fluido devido à difusão. Essa abordagem matemática teve um papel fundamental na fundamentação estatística da termodinâmica, ilustrando como comportamentos microscópicos podem levar a observações macroscópicas e, por extensão, nas leis termodinâmicas. Por fim, o trabalho de Langevin, em particular, expandiu a teoria cinética dos gases para englobar o movimento browniano, consolidando ainda mais a compreensão desse fenômeno.

Contudo, em diversos sistemas complexos, a difusão convencional não descreve adequadamente o processo de dispersão. Nestes casos, surge o fenômeno conhecido como difusão anômala, que será tratado no tópico seguinte.

4.1.3 A difusão anômala

Como já mencionado, os trabalhos de Einstein e Langevin revelaram que o espalhamento de partículas na difusão usual segue uma relação em que o deslocamento quadrático médio é proporcional ao tempo, isto é:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \propto t$$
 (4.9)

Nesses casos, o sistema está intrinsecamente ligado a uma distribuição gaussiana, o que implica que a solução da equação de difusão clássica assume a forma de uma função gaussiana. Esse resultado é derivado do teorema do limite central (EVANGELISTA; LENZI, 2018). Em outras palavras, o comportamento da difusão normal sempre segue um padrão gaussiano de dispersão. Esse comportamento é observado em uma ampla gama de fenômenos de transporte. Contudo, em certos sistemas, como na dispersão de poluentes na atmosfera, essas condições não se aplicam e o sistema exibe um comportamento distinto do convencional, sendo regido por uma difusão anômala. Nesses casos, os mecanismos de dispersão fogem ao padrão gaussiano, conduzindo a efeitos e padrões de propagação incomuns e mais complexos.

A difusão anômala difere da difusão usual em relação ao seu comportamento não linear e não local. Ela é influenciada por fatores como a heterogeneidade do meio, a presença de obstáculos ou barreiras, o transporte em redes fractais, entre outros (METZLER; KLAF-TER, 2000). Esses fatores podem levar a um comportamento de difusão não proporcional ao gradiente de concentração, resultando em um processo de dispersão mais complexo e não trivial.

O pioneiro na compreensão desse fenômeno foi Richardson, que, a partir de suas observações, concluiu que o crescimento da largura das plumas de poluentes emitidas por fontes pontuais ocorria na proporção de t^p com $p \ge 3$. Essa descoberta revelou uma inconsistência em relação à difusão típica, onde normalmente tem-se p = 1 (WEST, 2014).

Em seu artigo de 1926, intitulado "Atmospheric Diffusion shown on a Distance Neighbour Graph," ⁴ Richardson propõe uma equação de difusão não Fickiana. Ao contrário da abordagem convencional de considerar a concentração da substância sendo difundida em função da posição, Richardson considera o número de vizinhos por comprimento, q, em função da distância l entre eles. Assim, Richardson obtém uma equação com um coeficiente de difusão não constante, mas dependente da distância l. Essa abordagem inovadora permite a Richardson obter uma equação de difusão com um termo de difusão que não é constante, mas depende da distância l. Isso reflete a natureza complexa da difusão atmosférica, levando em consideração a interação entre vizinhos a diferentes distâncias. A equação resultante oferece uma descrição mais precisa e abrangente do fenômeno da difusão, capturando as características não lineares e não uniformes presentes neste processo. Tal equação foi denominada por Richardson como "Non-Fickian Diffusion" e é dada por

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial l} \left[f(l) \frac{\partial q}{\partial l} \right] \tag{4.10}$$

onde f(l) é uma função crescente de l.

Para determinar o valor de f(l), Richardson construiu um gráfico dos respectivos logarítmos da difusividade K e da distância de separação l, utilizando dados experimentais coletados por ele e informações disponíveis na literatura. A partir dessa análise, ele obteve que $f(l) \approx \varepsilon l^{4/3}$, onde ε é uma constante da ordem de 0,4 $cm^{2/3}s^{-1}$. A equação (4.10) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial l} \left[l^{4/3} \frac{\partial q}{\partial l} \right] \tag{4.11}$$

e tem solução na forma

$$q(l,t) = A\left(\frac{4t\varepsilon}{9}\right)^{-3/2} e^{-\frac{\theta^2}{4t\varepsilon/9}}$$
(4.12)

onde $\theta = l^{1/3}$ e A é uma constante que independente de t e θ (EVANGELISTA; LENZI, 2018). A solução (4.12) representa um processo no qual em t = 0 todos os vizinhos estão indefinidamente próximos e, com o passar do tempo, eles se espalham continuamente. De

⁴Difusão atmosférica demonstrada em um Gráfico de Vizinhança de Distância.(Tradução nossa)

sua análise, deduz-se que $\langle x(t) \rangle = 0$ e

$$\left\langle x^2(t) \right\rangle = \frac{105}{16} \left(\frac{4\varepsilon t}{9}\right)^3 \propto t^3$$
(4.13)

indicando que o deslocamento quadrático médio não segue uma relação linear com o tempo, diferente dos resultados obtidos nas abordagens de Einstein e Langevin. Nesse sentido, conclui-se que o fenômeno da turbulência pode implicar em um regime difusivo mais rápido, ou seja, um processo de superdifusão. Neste contexto, se $\langle x^2(t) \rangle \propto t^p$, com p > 1, o processo é chamado de superdifusão. Por outro lado, se p < 1, é chamado de subdifusão. Sendo assim, o fator p influencia na capacidade de espalhamento do sistema, ou seja, quanto menor for p, mais aprisionadas as partículas estão. A figura 4.1 ilustra o comportamento do deslocamento quadrático médio nos casos de comportamentos subdifusivo (p < 1), usual (p = 1) e superdifusivo (p > 1).



Figura 4.1: Comportamento do deslocamento quadrático médio para o caso subdifusivo (p < 1), usual (p = 1) e superdifusivo (p > 1). Fonte: (EVANGELISTA; LENZI, 2018)

Existem duas categorias distintas de difusão anômala. A primeira categoria é caracterizada por uma distribuição de probabilidade que se assemelha a uma distribuição gaussiana, como ilustrado na Figura 4.2. Nesse caso, o deslocamento quadrático médio das partículas segue uma lei de potência em relação ao tempo, que está relacionada à função de Mittag-Laffler, conforme expresso pela Eq. (4.14). Esse comportamento está intrinsecamente ligado à violação do teorema do limite central, que ocorre devido a distribuições amplas ou correlações de longo alcance.

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{2K_{\alpha}}{\Gamma(\alpha+1)} t^{\alpha}$$
 (4.14)

Esse tipo de comportamento foi originalmente descrito por Richardson em seu tratado sobre a difusão anômala (RICHARDSON, 1926). Ele foi pioneiro na compreensão dessa forma particular de difusão, observando padrões de dispersão que diferiam dos esperados



Figura 4.2: Propagador $\nu(x,t)$ para subdifusão com expoente de difusão anômala p=1/2, representado para os tempos consecutivos t=0,1; 1; 10. A forma em cúspide da função densidade de probabilidade são distintas.

Fonte: (METZLER; KLAFTER, 2000)

no movimento Browniano clássico. Seu trabalho lançou as bases para estudos sobre a difusão anômala e sua relação com distribuições não-gaussianas.

A segunda categoria de difusão anômala é conhecida como voos de Lévy. Eles são caracterizados por terem saltos aleatórios e não lineares, onde o tamanho e a direção dos saltos são determinados por uma distribuição de probabilidade de Lévy (EVANGELISTA; LENZI, 2018). A distribuição de Lévy é uma distribuição de probabilidade de cauda pesada, o que significa que eventos extremos têm uma probabilidade maior de ocorrer do que em uma distribuição normal. Ao contrário de uma distribuição gaussiana comum, esses processos seguem uma estatística estável de Lévy, apresentando comprimentos de salto distribuídos com uma cauda de lei de potência e divergência do segundo momento. Essa propriedade contrasta com o movimento browniano comum, onde todos os momentos da coordenada da partícula são finitos. A presença da difusão anômala pode ser explicada como um desvio das estatísticas normais de flutuações da distribuição gaussiana, levando à generalização do teorema do limite central por Lévy e Gnedenko (DUBKOV; SPAG-NOLO; UCHAIKIN, 2008).

A Figura 4.3, à direita, ilustra esse comportamento, no qual ocorrem saltos de diferentes magnitudes, abrangendo tanto grandes quanto pequenas distâncias, resultando em uma dispersão não convencional e imprevisível. Visualmente, as trajetórias dos voos de Lévy são facilmente distinguíveis daquelas do movimento browniano comum. Na mesma imagem, uma trajetória bidimensional de um voo de Lévy é comparada com uma trajetória de movimento browniano regular, à esquerda.

A distribuição de Lévy tem sido observada em diversas áreas da ciência, onde ocorrem fenômenos de invariância de escala ou onde eles podem ser suspeitos. Entre eles, a dinâmica caótica de sistemas complexos (ZASLAVSKY, 2005; SOLOMON; WEEKS; SWIN-NEY, 1993; SOLOMON; WEEKS; SWINNEY, 1994), a difusão fracionária (WEST *et al.*, 1997; CHAVES, 1998), a termodinâmica da difusão anômala (ZANETTE; ALEMANY, 1995), fundamentos dinâmicos de equilíbrio não canônico sociais (ANNUNZIATO; GRI-GOLINI; WEST, 2001), cinética quântica fracionária (KUSNEZOV; BULGAC; DANG,



Figura 4.3: Comparação das trajetórias de um passeio aleatório browniano ou subdifusivo (esquerda) e um voo de Lévy (direita). Enquanto ambas as trajetórias são estatisticamente autosimilares, a trajetória de caminhada de Lévy possui uma dimensão fractal, caracterizando a estrutura insular de aglomerados de passos menores, conectados por um passo longo. Ambos os passeios são desenhados para o mesmo número de passos (aprox. 7000). Fonte: (METZLER; KLAFTER, 2000)

1999), difusão por fluxos em meios porosos (PAINTER, 1996), difusão anômala na estratosfera (SEO; BOWMAN, 2000), etc. Além disso, os voos de Lévy têm grande relevância na modelagem da dispersão de poluentes. A aplicação dos voos de Lévy para a dispersão de poluentes permite levar em conta eventos extremos e dispersões anômalas, que são comuns nesse contexto. Diferentemente dos modelos tradicionais de dispersão que assumem movimentos suaves e regulares, os voos de Lévy são capazes de capturar movimentos erráticos e imprevisíveis que ocorrem naturalmente no ambiente, como ventos fortes ou mudanças abruptas na direção do vento, podem causar deslocamentos significativos dos poluentes em um curto período de tempo (SHLESINGER; WEST; KLAFTER, 1987). Essas variações imprevisíveis não são adequadamente consideradas em modelos de dispersão tradicionais, mas os voos de Lévy podem incorporá-las, tornando os resultados mais realistas e precisos.

Cálculo Fracionário

O cálculo diferencial e integral de ordem não inteira, remonta ao século XVII, quando pensadores como Leibniz e Euler começaram a explorar as possibilidades de extensão das operações diferenciais e integrais para potências fracionárias. Contudo, foi apenas no século XX que o cálculo fracionário encontrou bases mais sólidas e aplicações concretas, impulsionando um campo de estudo que se revela essencial em diversas áreas. Neste capítulo, será abordada a evolução histórica do cálculo fracionário, abrangendo as definições clássicas e suas aplicações, desde suas origens até os avanços contemporâneos que o elevaram à condição de uma ferramenta imprescindível para a modelagem e compreensão de fenômenos complexos.

5.1 História do Cálculo Fracionário

O cálculo fracionário, também chamado de cálculo diferencial e integral de ordem não inteira, é uma área da matemática que remonta ao final do século XVII, tendo surgido quase simultaneamente ao cálculo de ordem inteira. Acredita-se que a sua origem se deu através de uma suposta troca de correspondência entre L'Hospital e Leibniz em 1695, na qual Leibniz apresentou uma generalização da derivada de ordem n, inicialmente para valores de n inteiros. L'Hospital questionou o significado da derivada quando n assumisse valores não inteiros, como n = 1/2, ou seja:

$$D^{\frac{1}{2}}y(x) = \frac{d^{\frac{1}{2}}y(x)}{dx^{\frac{1}{2}}}$$
(5.1)

Em reposta a L'Hospital, Leibniz lhe assegurou que, para y(x) = x, a derivada valeria:

$$D^{\frac{1}{2}}y(x) = d^{\frac{1}{2}}x = x\sqrt{dx:x}$$
(5.2)

E acrescentou, quase que profeticamente: "Este é um aparente paradoxo do qual, um dia, consequências úteis serão obtidas" (MILLER; ROSS, 1993).

O questionamento feito por L'Hospital sobre o significado da derivada de ordem fracionária levou à popularização do termo "Cálculo Fracionário" para essa área da matemática. Entretanto, é importante notar que a ordem n não se limita apenas a números racionais, sendo possível que n assuma valores reais ou complexo (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015). Inicialmente, devido à falta de aplicabilidade, o cálculo fracionário foi negligenciado. No entanto, nas décadas seguintes, matemáticos renomados, como Euler, Lagrange, Laplace, Lacroix e Fourier, começaram a explorá-lo com o objetivo de desenvolver uma teoria consistente e abrangente.

Em 1730, Euler contribuiu significativamente para o assunto em uma dissertação, na qual escreveu ser possível obter algebricamente a razão $d^n p$ para dx^n quando n é um inteiro positivo e p é uma função de x. No entanto, ele se perguntou que tipo de razão poderia ser obtida se n fosse uma fração.

Euler reconheceu que a dificuldade em lidar com derivadas fracionárias surge porque a diferenciação não pode ser aplicada quando n é uma fração. Diante do problema, ele propôs que fosse aplicada a interpolação. Euler provavelmente usou esse método para encontrar aproximações de derivadas fracionárias em casos onde a diferenciação contínua não era possível. (MILLER; ROSS, 1993).

No mesmo século, Lagrange fez uma contribuição indireta para o desenvolvimento do cálculo fracionário ao formular a chamada lei dos expoentes. Essa lei considera y como uma função de $x \in m$, e n números naturais:

$$\frac{d^m}{dx^m}\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{d^{m+n}y}{dx^{m+n}} \tag{5.3}$$

Posteriormente, com o desenvolvimento do cálculo fracionário, o resultado obtido por Lagrange chamou a atenção da comunidade matemática. Eles estavam interessados em determinar quais restrições deveriam ser impostas a y(x) para que a Eq. (5.3) fosse válida para valores arbitrários de m e n. Esse estudo mostrou que a lei dos expoentes proposta por Lagrange não era válida para todas as funções, quando m e n eram arbitrários, contudo os resultados obtidos, representaram um avanço no desenvolvimento dessa área (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015).

A partir do início do século XIX, diversos autores contribuíram sistematicamente para o tema. Entre eles, destacam-se Pierre Simon de Laplace (1749–1827) e Silvestre François Lacroix (1765-1843). Em 1812, Laplace definiu a derivada fracionária por meio de uma integral, enquanto Lacroix foi o primeiro a mencionar as derivadas de ordem não inteira em seu livro de cálculo em 1819. Nessa obra, Lacroix apresenta uma fórmula para calcular a n-ésima derivada de uma função do tipo $y = x^m$, que é expressa por:

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{d^n x^m}{dx^n} = D^n x^m = \frac{m!}{(m-n)!} x^{m-n}$$
(5.4)

onde $m \in \mathbb{Z}_+$ e $n \leq m$. Substituindo a função gama no lugar do fatorial, e n por α e m por β obtém-se:

$$D^{\alpha}x^{\beta} = \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta-\alpha+1)}x^{\beta-\alpha}$$
(5.5)

onde α e β são números fracionários (MILLER; ROSS, 1993). Esse problema foi fundamental para a evolução do cálculo fracionário, já que utilizando os valores de $\alpha = 1/2$ e $\beta = 1$ nessa equação, obtém-se o mesmo resultado descrito na formulação de Riemann-Liouville.

Em 1822, em seu estudo sobre derivadas de ordem não inteira, Jean Baptista Joseph Fourier (1768-1830) obteve a representação integral de uma função f(x), dada por:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) d\xi \int_{-\infty}^{\infty} \cos[t(x-\xi)] dt$$
(5.6)

cujas derivadas de ordens inteiras $n = 1, 2, \dots$ são dadas por

$$D^{n}f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi)d\xi \int_{-\infty}^{\infty} t^{n} \cos\left[t(x-\xi) + \frac{n\pi}{2}\right]dt$$
(5.7)

Substituindo o inteiro n por α , real arbitrário, Fourier obteve formalmente a versão generalizada para suas derivadas de ordens não inteiras, a saber

$$D^{\alpha}f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi)d\xi \int_{-\infty}^{\infty} t^{\alpha}\cos\left[t(x-\xi) + \frac{\alpha\pi}{2}\right]dt$$
(5.8)

Ao desenvolver a teoria, Fourier chegou à conclusão de que o número α que aparece na fórmula pode ser considerado como qualquer valor, positivo ou negativo (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015). A Eq. (5.8) é amplamente conhecida como a representação integral de Fourier generalizada. A partir desse momento, o Cálculo Fracionário começou a ser aplicado em diversas situações e problemas, não apenas na matemática, mas também em outras áreas do conhecimento. Embora nomes como Leibniz, Euler, Lagrange, Laplace tenham contribuído significativamente para essa área, foi a partir do trabalho de Fourier que o Cálculo Fracinário começou a se expandir e popularizar.

Em 1823, Niels Henrik Abel (1802-1829) realizou a primeira operação fracionária propriamente dita ao resolver uma equação integral proveniente do problema da tautócrona. Esse problema trata da determinação da forma de uma curva plana $f(\varrho)$, suave, que passa pela origem em um plano vertical, de tal forma que uma partícula de massa m, sujeita à ação da gravidade, possa cair sobre ela de maneira que o tempo de descida seja o mesmo, independentemente da posição inicial. Como T_a é constante, a equação integral de Abel que modela o problema é dada por:

$$\sqrt{2g}T_a = \int_0^{\overline{\eta}} (\varrho - t)^{-1/2} f'(t) dt$$
(5.9)

onde g é a aceleração da gravidade e (ξ, ϱ) é a posição inicial (RAMOS, 2012). A Eq. (5.9) é equivalente à equação fracionária:

$$f'(\varrho) = T_a \sqrt{\frac{2g}{\pi}} o D_{\overline{\eta}}^{1/2}(1) = \sqrt{\frac{2a}{\varrho}}$$
(5.10)

onde $a = gT_a^2/\pi^2$. A Eq. (5.10) fornece a solução da equação, a qual se conclui que é uma cicloide, com o vértice localizado na origem e tangente ao eixo x. A solução de Abel fundamenta-se no fato de que a derivada fracionária de uma função constante não é sempre nula, conforme afirmado por Lacroix (OLDHAM; SPANIER, 1974). Nesse contexto, tem-se $D_{\varrho}^{1/2}(1) = (\pi \varrho)^{-\frac{1}{2}}$.

Inspirado possivelmente pela solução elegante de Abel, Joseph Liouville (1809-1882) realizou um estudo fundamental para fornecer uma definição lógica das derivadas fracionárias, explorando o tema a partir de dois pontos de vista distintos. O primeiro envolveu a definição da derivada de ordem n como se n fosse um inteiro positivo, enquanto o segundo consistiu na expansão de funções em séries de potências. Nesse sentido, Liouville partiu do resultado já conhecido para a derivada de ordem n:

$$D^n e^{ax} = a^n e^{ax} \tag{5.11}$$

onde $D = \frac{d}{dx}$ e $n \in \mathbb{N}$, estendido para uma ordem não inteira. Liouville considerou a expansão em série para a função f(x) como:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k e^{a_k x}, \qquad Re(a_k) > 0$$
 (5.12)

e definiu a derivada de ordem não inteira por:

$$D^{\alpha}f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k a_k^{\alpha} e^{a_k x}$$
(5.13)

Essa equação é chamada de primeira fórmula de Liouville para a derivada de ordem não inteira, entretanto, sua aplicação se restringe a um conjunto específico de funções, definidas pela Eq. (5.12). Devido à limitação mencionada e com o objetivo de ampliar sua primeira definição, Liouville propôs uma outra definição para a derivada fracionária, utilizando a função gama. Essa outra abordagem foi aplicada à função x^{-a} com Re(a) > 0, e é conhecida como segunda definição de Liouville para a derivada de ordem não inteira (DAVID; LINARES; PALLONE, 2011). Ela é expressa por:

$$D^{\alpha}x^{-a} = (-1)^{\alpha} \frac{\Gamma(\alpha+a)}{\Gamma(a)} x^{-\alpha-a}$$
(5.14)

Todavia, essa definição é útil apenas para funções racionais do tipo x^{-a} com Re(a) > 0. É importante mencionar que Liouville foi o primeiro a tentar resolver equações diferenciais que envolviam operadores fracionários. O objetivo de sua investigação era encontrar uma função complementar que surgia a partir de uma equação diferencial de ordem não inteira.

Anton Karl Grünwald (1838-1920), teve um papel fundamental na unificação dos resultados obtidos por Riemann e Liouville em relação às derivadas fracionárias. Insatisfeito com as restrições da definição proposta por Liouville, em 1867, Grünwald propôs uma nova definição para a derivada fracionária, baseada no limite de um quociente de diferenças.

Essa definição resultou em fórmulas de integrais definidas de derivadas de ordem n, que foram amplamente utilizadas em diversas aplicações práticas. Além disso, Grünwald mostrou que uma integral definida de Riemann deve ser interpretada como tendo um limite inferior finito, enquanto a definição de Liouville não apresenta um limite inferior finito, mas um limite inferior menos infinito (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015). Assim, a ideia de derivada fracionária como o limite da soma de quocientes é dada por:

$$D^{\alpha}f(x) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{h^{\alpha}} \sum_{j=0}^{n} (-1)^{j} \frac{\Gamma(\alpha+1)f(x-jh)}{\Gamma(j+1)\Gamma(\alpha-j+1)}$$
(5.15)

A formulação de Grünwald também foi aplicada no estudo da inversão, em que é possível determinar a função desconhecida f(t) na equação integral, utilizando operações fracionárias, quando se conhece uma função Φ de x. Ela é expressa por:

$$\Phi(x) = \int_0^x (x-t)^p f(t)dt$$
(5.16)

A partir da década de 1860, houve um crescente interesse no estudo de operadores fracionários (integrais e derivadas). Esses operadores têm como base a conhecida fórmula integral de Cauchy-Goursat, que desempenha um papel fundamental em várias áreas da matemática, como análise complexa, teoria das integrais, equações diferenciais, entre outras. Esses operadores também foram estudados por Letnikov em 1868, Laurent em 1884 e Heaviside em 1892. O primeiro trabalho que levou à formulação da derivada fracionária segundo Riemann-Liouville foi escrito por Sonin em 1869 (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015). Nesse trabalho, Sonin utilizou como ponto de partida a fórmula integral de Cauchy para a derivada de ordem n de uma função analítica, que em análise complexa é dada por:

$$D^{n}f(z) = \frac{n!}{2\pi i} \int_{C} \frac{f(t)}{(t-z)^{n+1}} dt$$
(5.17)

onde C é um conveniente contorno fechado.

Em 1872, três anos após o trabalho de Sonin, Letnikov ampliou a teoria dos operadores fracionários. Ele utilizou a mesma abordagem de Sonin, utilizando a fórmula integral de Cauchy como referência e um contorno circular fechado em uma superfície de Riemann. Em 1884, Laurent publicou um trabalho fundamental sobre operadores generalizados, que é considerado um marco inicial para o desenvolvimento moderno do Cálculo Fracionário. Nesse trabalho, ele generalizou a fórmula integral de Cauchy e, em contraste com modelo proposto por Sonin e Letnikov, ele propôs um contorno aberto em uma superfície de Riemann (TEODORO; OLIVEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2018). Usando o método de integração no plano complexo, ele introduziu a definição fundamental de uma integral não inteira de ordem α , dada por:

$${}_{a}\mathrm{D}_{x}^{-\alpha}f(x) =_{a} \mathrm{J}_{x}^{\alpha}f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{a}^{x} (x-t)^{\alpha-1}f(t)dt$$
(5.18)

onde ${}_{0}D_{x}^{-\alpha} \equiv_{a} J_{x}^{\alpha}$ é o operador integral de Riemann-Liouville. A definição apresentada é uma das versões atualmente conhecida como definição de integral de ordem não inteira de Riemann-Liouville. É importante notar que a definição para integral não inteira de Riemann-Liouville, dada pela Eq. (5.18), coincide com a fórmula de Abel apresentada na Eq. (5.9) quando $\alpha = 1/2$ e com a definição de Riemann quando x > a, sem a inclusão da função complementar (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015). No entanto, quando a = 0, a expressão da Eq. (5.18) assume a forma da definição atual de integral de ordem não inteira de Riemann-Liouville, expressa por:

$${}_{0}\mathrm{D}_{x}^{-\alpha}f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{0}^{x} (x-t)^{\alpha-1} f(t) dt + \phi(t), \qquad Re(\alpha) > 0 \tag{5.19}$$

É interessante notar que Lacroix, seguindo a abordagem típica dos formalistas clássicos da época, obteve o mesmo resultado expresso anteriormente.

Por outro lado, a definição da derivada de ordem não inteira de Riemann-Liouville é estabelecida a partir da lei dos expoentes e do princípio de que a derivação é a operação inversa da integração. Ela é expressa por:

$${}_{0}D_{x}^{\beta}f(x) = D^{n}[J^{\alpha}f(x)], \qquad x > 0$$
(5.20)

onde $J^{\alpha}f(x)$ é integral fracionária de Riemann-Liouville e ${}_{0}D_{x}^{\beta}f(x)$ é a derivada fracionária de Riemann-Liouville com $\beta > 0$ e $\beta = n - \alpha$ (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015).

Em 1888, Nekrassov (1853-1924) também obteve a definição fundamental da fórmula integral de Cauchy (vide Eq. 5.18) por meio de um contorno de integração diferente dos seus antecessores, ainda que tenha utilizado a mesma metodologia.

Embora vários autores tenham usado esses operadores, foram as aplicações brilhantes de Oliver Heaviside (1850-1925) que impulsionaram seu desenvolvimento. Heaviside demonstrou como solucionar determinadas equações diferenciais lineares utilizando operadores generalizados, que são imprescindíveis na resolução de problemas em engenharia, como a transmissão de correntes elétricas através de condutores. Seus métodos foram reunidos sob o nome de cálculo operacional de Heaviside (KILBAS; MARICHEV; SAMKO, 1993). Inspirado no operador simbólico de Gregory para a solução da equação do calor, Heaviside utilizou a letra p como operador diferencial para representar d/dt e aplicou essa ideia na solução da equação de difusão para distribuição de temperatura. Ele interpretou $\sqrt{p} = D^{1/2}$ de modo que $_0 D_{1/2}^t(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}}$, ou seja, a derivada da constante não é zero. Embora os resultados de Heaviside estivessem corretos, ele não conseguiu justificá-los com rigor matemático necessário. Apenas em 1919, Bromwich conseguiu formalizar e justificar os resultados de Heaviside de forma consistente (TEODORO; OLIVEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2018).

Durante o século XX, o Cálculo fracionário recebeu relevantes contribuições de diversos autores. Na primeira década do século XX, destacaram-se importantes colaboradores, tais como Pincherle (1853-1936), precursor das famosas integrais de Mellin (1854-1933)-Barnes, Hardy (1877-1947) e Weyl (1885-1955). Este último, em particular, foi responsável por outra definição para integral de ordem não inteira e pela conhecida derivada fracionária de Weyl, definida por:

$$D[W^{\alpha}f(t)] = W^{-\alpha}f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty x^{\alpha-1}f(x+t)dx$$
(5.21)

Em 1930, Post empregou quocientes de diferenças para ampliar a definição de derivada não

inteira proposta por Grünwald. Ele definiu a diferenciação para operadores generalizados f(D), onde D denota a diferenciação e f uma função adequada. Dessa forma, estabeleceu a derivada de ordem não inteira Grünwald-Letnikov, uma ferramenta muito eficaz na solução de problemas numéricos, expressa por:

$$D^{\alpha}f(x_0) = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \left(\frac{x_0}{n}\right)^{-\alpha} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} f\left(x_0 - k\frac{x_0}{n}\right)$$
(5.22)

A partir de 1940, Erdélyi e Kober se destacaram por investigar as propriedades da integral fracionária. Enquanto estudavam equações integrais duais, Erdélyi propôs uma modificação nos operadores de Riemann-Liouville, que resultou nos operadores de Erdélyi-Kober. Em 1965, Cooke generalizou os operadores integrais de Erdélyi-Kober e demonstrou sua utilidade na obtenção de soluções de equações integrais na eletrostática.

Mais tarde, em 1969, Caputo propôs uma nova definição para a derivada de ordem não inteira, com o objetivo de resolver um problema relacionado à viscoelasticidade. Expressa por:

$$D^{\beta}f(x) =_{c} J^{\alpha}_{x}[D^{n}f(x)]$$
(5.23)

Essa definição tem como principal vantagem o fato de levar em conta as condições iniciais do problema, o que permite preservar as informações iniciais presentes na modelagem de fenômenos físicos complexos.

Em 1974, Ross organizou a primeira Conferência Internacional sobre Cálculo Fracionário, tendo como um dos objetivos a disseminação do conhecimento sobre o Cálculo de Ordem não Inteira e o incentivo para a descoberta de novas aplicações (TEODORO; OLIVEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2018).

Em 1992, Caputo publicou um artigo propondo uma alteração na definição da derivada fracionária, baseando-se em um trabalho divulgado em derivadas fracionárias clássicas. Essa mudança foi importante na resolução de equações diferenciais fracionárias que envolvem condições iniciais, particularmente em problemas de sismologia. A definição proposta por Caputo é expressa por:

$$D^{\beta}f(t) = \frac{1}{\Gamma(\beta - m)} \int_{0}^{t} \frac{f^{(m)}(\tau)}{(t - \tau)^{\beta + 1 - m}} d\tau$$
(5.24)

com $m-1 \leq \beta < m$. Nos anos 2000, o cálculo de ordem não inteira teve um avanço significativo, impulsionado pela publicação de diversos livros e artigos sobre o tema, além da realização de eventos acadêmicos em todo o mundo. Nesse contexto, várias definições

importantes surgiram, incluindo as derivadas locais propostas por Atangana & Baleanu (2016), Katugampola (2011), Chen (2005) e Khalil *et al.* (2014), bem como as derivadas com núcleo não singular, propostas por Caputo & Fabrizio (2015), Atangana & Baleanu (2016), Yang, Srivastava & Machado (2015), Sun *et al.* (2017) e outros.

Embora as formulações clássicas de Riemann-Liouville, Caputo e Grunwald-Letnikov sejam as mais conhecidas e amplamente utilizadas, elas apresentam algumas limitações em relação às regras tradicionais do cálculo, o que pode dificultar sua aplicação em problemas práticos. Neste ponto é importante mencionar o trabalho de Khalil et al. (2014) que propuseram uma nova formulação, denominada derivada conforme, que tem recebido grande destaque nos últimos anos. Embora seja uma derivada local, ou seja, não apresente efeito de memória, a principal vantagem dessa definição em relação às formulações clássicas é que ela permite a extensão das regras do cálculo de ordem inteira para o caso fracionário. Apesar de existir uma discussão entre os pesquisadores se a derivada conforme é ou não uma derivada fracionária (ABDELHAKIM; MACHADO, 2019; ABDELHAKIM, 2019; ANDERSON; CAMRUD; ULNESS, 2018), ela tem sido usada em diversas áreas do conhecimento, como a mecânica Newtoniana (CHUNG, 2015), a mecânica quântica (AN-DERSON; CAMRUD; ULNESS, 2018), transporte difusivo (IYIOLA et al., 2017; AVCI; EROGLU; OZDEMIR, 2017) e processos estocásticos (CENESIZ; KURT; NANE, 2017). O campo do cálculo fracionário tem testemunhado avanços significativos nos últimos anos, mas a literatura ainda apresenta diversas questões em aberto. Uma das principais questões é a falta de uma definição geral adequada para todas as aplicações, enquanto outra preocupação importante é a resolução do problema da dimensionalidade que surge ao solucionar equações diferenciais fracionárias. Além disso, é crucial ter uma interpretação precisa, tanto geométrica quanto física, das derivadas fracionárias. Todas essas questões são fundamentais para o desenvolvimento e aplicação das técnicas de cálculo de ordem não inteira em diversas áreas da ciência e tecnologia. Embora ainda haja desafios a serem superados, espera-se que as respostas para essas questões sejam encontradas nos próximos anos, permitindo avanços ainda mais significativos no campo do cálculo fracionário.

5.2 Derivadas Fracionárias Clássicas

Na literatura existem diversas definições que abrangem o conceito de derivada fracionária (CAPELAS DE OLIVEIRA; MACHADO *et al.*, 2014; RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015). Este capítulo é dedicado ao estudo das principais definições relacionadas as derivadas fracionárias clássicas, que tiveram origem na formulação de Sonin (SONIN, 1869). Entre as diversas formulações que compõem essa classe, destacam-se as derivadas de Liouville, Riemann-Liouville, Caputo (CAPUTO, 1967; DZRBASHYAN; NER-SESYAN, 1968), Grünwald-Letnikov, Marchaud, Chen, Hadamard, Riesz, Weyl, Osler, Hilfer, Davidson-Essex, Coimbra, Canavati, Cossar (CAPELAS DE OLIVEIRA; MA- CHADO et al., 2014), Jumarie (JUMARIE, 2005; LIU, 2015), Caputo-Hadamard (AL-MEIDA, 2017), Hilfer-Katugampola (OLIVEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2018a), a derivada fracionária tipo Caputo (OLIVEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2019), a derivada (κ, ρ)-fracionária (OLIVEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2018b) e a ψ -Hilfer (SOUSA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2019). Segundo Li & Deng (2007), às formulações clássicas de Riemann-Liouville, Caputo e Grunwald-Letnikov são as mais conhecidas e amplamente empregadas na literatura. No apêndice A, são apresentadas as definições fundamentais, os principais teoremas e lemas relacionados às derivadas fracionárias clássicas.

Cálculo Diferencial e Integral Conformável

A derivada conformável, introduzida por Khalil *et al.* (2014), é uma nova definição de derivada fracionária local. Embora alguns autores, como Abdelhakim (2019), Abdelhakim & Machado (2019), Tarasov (2018), Anderson, Camrud & Ulness (2018), não a considerem uma derivada fracionária em si, ela tem se mostrado uma alternativa interessante para muitos pesquisadores. Ao contrário das definições clássicas discutidas no capítulo anterior, que muitas vezes não cumprem propriedades fundamentais, como as regras do produto, quociente e cadeia (ATANGANA, 2015; CHEN; YAN; ZHANG, 2010; BABAKHANI; DAFTARDAR-GEJJI, 2002), a nova definição é uma extensão natural da derivada convencional e apresenta a vantagem de satisfazer praticamente todas as propriedades do cálculo de ordem inteira, conforme será visto neste capítulo. Além disso, a derivada conforme tem sido utilizada em várias áreas da ciência, como a mecânica Newtoniana (CHUNG, 2015), mecânica quântica (ANDERSON; ULNESS, 2015), transporte difusivo (AVCI; EROĞLU; ÖZDEMIR, 2017; IYIOLA *et al.*, 2017; ZHOU; YANG; ZHANG, 2018) e processos estocásticos (CENESIZ; KURT; NANE, 2017).

Recentemente, Abdeljawad (2015) publicou um artigo introduzindo o cálculo fracionário conforme ou conformável. Neste trabalho, o autor explora as propriedades das derivadas conformáveis, tanto à esquerda quanto à direita. Ele apresenta diversos lemas e teoremas e demonstra um teorema análogo ao teorema fundamental do cálculo, bem como a regra da cadeia. Contudo, é importante salientar que a derivada conformável não atende a certos critérios definidos por Ortigueira e Machado, como apresentados no apêndice A. Diferentemente das derivadas de ordem inteira, a derivada conformável não retorna a própria função quando sua ordem é zero. Além disso, ela não satisfaz a propriedade de semigrupo. Portanto, a derivada conformável não é considerada uma derivada fracionária (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015).

Apesar desses desafios, a derivada conformável é uma área de pesquisa promissora, que tem atraído cada vez mais interesse de pesquisadores em diversas áreas do conhecimento.

6.1 Derivada conformável

Nesta seção, será apresentada a definição da derivada fracionária conformável, bem como os principais teoremas pertinentes a essa teoria. As demonstrações dos principais resultados encontram-se disponíveis no apêndice B. Esta seção foi fundamentada em pesquisas realizadas por Abdelhakim (2019), Musraini *et al.* (2019), Khalil *et al.* (2014) e Ortigueira & Machado (2015).

Definição 6.1. Definição da derivada conformável.

Seja $f(t): [0, \infty) \to \mathbb{R}$. A derivada conformável de uma função f de ordem α é definida por:

$$\overline{T}_{\alpha}[f(t)] = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) - f(t)}{\varepsilon}$$
(6.1)

para todo t > 0, $\alpha \in (0,1]$. Se f é α -diferenciável em (0,a), a > 0, $e \lim_{t \to 0^+} f^{\alpha}(t)$ existe, então:

$$f^{\alpha}(0) = \lim_{t \to 0^+} f^{\alpha}(t)$$
 (6.2)

Além disso, Khalil *et al.* (2014) mostraram que a relação entre a derivada conformável e a primeira derivada pode ser representada por:

$$\overline{T}_{\alpha}[f(t)] = t^{1-\alpha} \frac{df(t)}{dt}$$
(6.3)

Nesse sentido, fica evidente que a derivada conformável é um operador local e coincide com a primeira derivada quando a ordem é $\alpha = 1, 0$.

Teorema 6.1. Se uma função $f(t) : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ é α -diferenciável em $t_0 > 0$, $\alpha \in (0, 1]$, então f é contínua em t_0 .

Teorema 6.2. Sejam $\alpha \in (0,1]$ e f, g são funções α -diferenciáveis em um ponto t > 0. Então:

 $\begin{array}{l} (1) \ \overline{T}_{\alpha}(af+bg) = a\overline{T}_{\alpha}(f) + b\overline{T}_{\alpha}(g), \ para \ todo \ a,b \in \mathbb{R} \\ (2) \ \overline{T}_{\alpha}(t^{p}) = pt^{p-\alpha}, \ para \ todo \ p \in \mathbb{R} \\ (3) \ \overline{T}_{\alpha}(\lambda) = 0, \ para \ toda \ função \ constante \ f(t) = \lambda, \ onde \ \lambda \in \mathbb{R} \\ (4) \ \overline{T}_{\alpha}(f.g) = f.\overline{T}_{\alpha}(g) + g.\overline{T}_{\alpha}(f) \\ (5) \ \overline{T}_{\alpha}(f/g) = \frac{f.\overline{T}_{\alpha}(g) - g.\overline{T}_{\alpha}(f)}{g^{2}} \\ (6) \ Se, \ além \ disso, \ f \ é \ diferenciável, \ então \ \overline{T}_{\alpha}[f(t)] = t^{1-\alpha} \frac{df(t)}{dt} \\ (7) \ \overline{T}_{t}^{\alpha}(fog)(t) \ = \ \left[\overline{T}_{g(t)}^{\alpha}f(g(t))\right] \left[\overline{T}_{t}^{\alpha}g(t)\right] g(t)^{\alpha-1} \ supondo \ que \ a \ derivada \ conformável \\ \overline{T}_{t}^{\alpha}(fog)(t) \ exista. \end{array}$

Observa-se que essas propriedades são as mesmas que são satisfeitas pelas derivadas de ordem inteira, incluindo a sétima, conhecida como a regra de Leibniz. Em geral, as derivadas de ordem fracionária, como as de Riemann-Liouville e Caputo, não são satisfatórias em relação às propriedades 4 e 7; portanto, a derivada conformável se destaca, tornando-se uma alternativa interessante para a manipulação de equações diferenciais fracionárias.

Teorema 6.3. Sejam x = x'(t) e y = y'(t) funções diferenciáveis em t, e seja z = f(x, y)diferenciável em (x'(t), y'(t)). Então, z = f(x'(t), y'(t)) é diferenciável em t e

$$\overline{T}^{\alpha}z(t) = \frac{\partial f}{\partial x}\overline{T}^{\alpha}x'(t) + \frac{\partial f}{\partial y}\overline{T}^{\alpha}y'(t)$$
(6.4)

Teorema 6.4. Teorema de Rolle para funções diferenciáveis fracionárias conformáveis

Seja a > 0 e $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ uma função dada que satisfaz: (i) f é contínua em [a, b], (ii) f é α -diferenciável para alguma $\alpha \in (0, 1)$, (iii) f(a) = f(b). Então, existe $c \in (a, b)$, tal que $\overline{T}_{\alpha}f(c) = 0$.

Teorema 6.5. Teorema do Valor Médio para Funções Diferenciáveis Fracionais Conformáveis.

Seja a > 0 $e f : [a, b] \to \mathbb{R}$ uma função dada que satisfaz: (i) f é contínua em [a, b]. (ii) $f é \alpha$ -diferenciável para algum $c \in (0, 1)$. Então, existe $c \in (a, b)$, tal que $f^{\alpha}(c) = \frac{f(b) - f(a)}{\frac{1}{\alpha}b^{\alpha} - \frac{1}{\alpha}a^{\alpha}}$.

6.2 Integral conformável

Nesta seção, será introduzida a definição da integral fracionária conformável, acompanhada de suas principais propriedades e teoremas. Esta seção foi fundamentada em pesquisas realizadas por Abdelhakim (2019), Musraini *et al.* (2019) e Ortigueira & Machado (2015).

Definição 6.2. Integral conformável

Para f contínua, a Integral Conformável é definida por:

$$I_a^{\alpha} f(t) = \int_a^t (\xi - a)^{\alpha - 1} f(\xi) d\xi$$
(6.5)

para $\alpha \in (0, 1)$.

A Eq. (6.5) também pode ser reescrita como:

$$I_a^{\alpha}f(t) = \int_a^t f(\xi)d_a^{\alpha}\xi$$

Além disso, no caso de a = 0, pode-se inferir que:

$$I^{\alpha}f(t) = \int_0^t \xi^{\alpha-1}f(\xi)d\xi = \int_0^t f(\xi)d^{\alpha}\xi$$

Teorema 6.6. Se f é diferenciável e a = 0, então a seguinte propriedade é válida:

$$I_a^{\alpha} \overline{T}_t^{\alpha} f(t) = f(t) - f(0) \tag{6.6}$$

Teorema 6.7. Propriedades das integrais fracionárias conformáveis

Se $a \ge 0, \ \alpha \in (0,1)$ e $f,g:[a,b] \to \mathbb{R}$ sejam funções contínuas. Então: (1) $\int_a^b \lambda \xi^{\alpha-1} d\xi = \lambda \int_a^b \xi^{\alpha-1} d\xi, \lambda \in \mathbb{R}$ (2) $\int_a^b (f(x) \pm g(x)) \xi^{\alpha-1} d\xi = \int_a^b f(x) \xi^{\alpha-1} d\xi \pm \int_a^b g(x) \xi^{\alpha-1} d\xi$ (3) $\int_a^b f(x) \xi^{\alpha-1} d\xi = -\int_b^a f(x) \xi^{\alpha-1} d\xi$ (4) $\int_a^b f(x) \xi^{\alpha-1} d\xi = \int_a^c f(x) \xi^{\alpha-1} d\xi + \int_c^b f(x) \xi^{\alpha-1} d\xi$ (5) $\int_a^a f(x) \xi^{\alpha-1} d\xi = 0$

Teorema 6.8. Sejam $a \ge 0$ $e \alpha \in (0,1]$. Além disso, sejam $f,g : [a,b] \to \mathbb{R}$ funções contínuas. Então:

(1) Se $f(x) \ge 0$ para todo $x \in [a, b]$, então $\int_a^b f(x)\xi^{\alpha-1}d\xi \ge 0$. (2) Se $f(x) \ge g(x)$ para todo $x \in [a, b]$, então $\int_a^b f(x)\xi^{\alpha-1}d\xi \ge \int_a^b g(x)\xi^{\alpha-1}d\xi$ (3) $\left|\int_a^b f(x)\xi^{\alpha-1}d\xi\right| \le \int_a^b |f(x)|\xi^{\alpha-1}d\xi$.

Solução da Equação de Advecção-Difusão conformável

Nesta seção, serão apresentadas duas soluções distintas para a equação de advecçãodifusão conformável. A primeira considera um modelo bidimensional estacionário, no qual os parâmetros fracionários estão presentes em todas as derivadas. Na segunda solução, são considerados dois cenários: o primeiro refere-se a um modelo bidimensional transiente, com derivadas fracionárias apenas nos termos temporal e advectivo; já o segundo introduz parâmetros fracionários em todos os termos da equação. Para que esse objetivo seja alcançado, foi utilizado o método GILTT (WORTMANN et al., 2005; MO-REIRA et al., 2005; MOREIRA et al., 2006; MOREIRA et al., 2009; BUSKE et al., 2007a; BUSKE et al., 2007b; TIRABASSI et al., 2008; BUSKE DANIELA et al., 2017), juntamente com o conceito de derivadas conformáveis (KHALIL et al., 2014). A novidade deste estudo reside na inserção de parâmetros fracionários distintos nos termos difusivo, advectivo e transiente da equação de dispersão de poluentes, juntamente com o uso das derivadas conformáveis, levando em consideração o comportamento anômalo do problema. Isso resultou em uma nova metodologia, denominada aqui de método α -GILTT. Essa metodologia é uma solução em séries que considera a falta de homogeneidade da turbulência na direção vertical. Ela permite o uso de coeficientes de difusão e velocidade do vento que são dependentes das variáveis espaciais, possibilitando uma descrição mais realística do processo de dispersão de poluentes. É importante destacar que as soluções analíticas propostas neste trabalho para a equação de advecção-difusão, considerando até três parâmetros fracionários distintos e coeficientes variáveis, não são conhecidas na literatura.

7.1 Equação de advecção-difusão de ordem inteira

Na literatura, a equação de advecção-difusão clássica é amplamente utilizada para estudar a distribuição espacial da concentração de poluentes não reativos na CLP. Essa equação é obtida aplicando-se o princípio da continuidade ou conservação da massa, onde os fluxos são representados pela teoria K (BLACKADAR, 2012; CSANADY, 1973). Em um sistema de coordenadas cartesianas, a distribuição espacial da concentração de uma substância não reativa pode ser descrita por:

$$\underbrace{\frac{\partial C}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z}}_{(II)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{(III)} + S^* \quad (7.1)$$

Na Eq. (7.1) o termo indicado por (I), representa a variação temporal local da concentração (termo euleriano); os termos indicados por (II), representam o transporte realizado pelo vento médio (termo advectivo); os termos indicados por (III), representam a mistura oriunda dos fluxos turbulentos (termo difusivo), e S^* representa o termo fonte.

No presente estudo, será adotado o sistema de referência Euleriano, em que a direção do vento médio u é coincidente com o eixo x, o eixo y é perpendicular à direção do vento médio, e o eixo z indica a altura, sendo o nível do solo considerado como ponto zero. Neste sistema de referência, o termo $v\frac{\partial C}{\partial y}$ será desconsiderado, uma vez que a velocidade média do vento na direção y é praticamente nula. Como a magnitude do termo $u\frac{\partial C}{\partial x}$ é significativamente maior do que a magnitude do termo $\frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial C}{\partial x})$, é possível negligenciar o efeito da difusão turbulenta na direção do vento médio. Da mesma forma, o termo advectivo $w\frac{\partial C}{\partial z}$ na direção vertical pode ser desprezado, uma vez que é consideravelmente menor do que os demais termos da equação. Desta forma a Eq. (7.1) pode ser escrita na seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S^*$$
(7.2)

Em seguida, a Eq. (7.2) é integrada na direção y, de modo que:

$$c(x,z,t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x,y,z,t) dy$$
(7.3)

Além disso, considera-se que não há sumidouros ou fontes extras a favor do vento a partir da fonte pontual. Dessa forma, a Eq. (7.2) pode ser expressa como:

$$\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial t} + u(z)\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial z}\right)$$
(7.4)

Portanto, a Eq. (7.4) representa a equação de advecção-difusão clássica de ordem inteira, cuja solução fornece a distribuição espacial da concentração de poluentes provenientes de uma fonte pontual que libera um traçador químico não reativo na atmosfera, abandonado sem empuxo.

7.2 Solução da equação de advecção-difusão bidimensional estacionária conformável

Na presente seção, é proposta uma nova abordagem para a compreensão do processo de dispersão de poluentes atmosféricos, utilizando o método α -GILTT. Para tal, a estrutura matemática da equação clássica de advecção-difusão, representada pela Eq. (7.4), foi modificada por meio da inserção de operadores fracionários nos termos difusivo e advectivo, conforme sugerido por Goulart *et al.* (2017). Considerando o modelo estacionário, a equação resultante é expressa por:

$$u(z)\frac{\partial^{\alpha}c(x,z)}{\partial x^{\alpha}} = \frac{\partial^{\beta}}{\partial z^{\beta}} \left(K_{z}(z)\frac{\partial^{\beta}c(x,z)}{\partial z^{\beta}} \right), \quad 0 < \alpha, \beta \leqslant 1$$
(7.5)

para 0 < z < h e x > 0, onde h é a altura da CLP (m), u(z) é o perfil vertical da velocidade do vento (m/s) na direção do eixo x, c é a concentração do poluente passivo integrada lateralmente (g/m^2) , $K_z(z)$ é coeficiente de difusão vertical (m^2/s) e α , β são as ordens dos operadores fracionários. Na direção da coordenada espacial z as condições de contorno são de fluxo nulo no solo (z = 0) e na altura h da CLP, sendo a condição de fonte dada por:

$$c(0,z) = \frac{Q}{u(z)}\delta(z-h_s) \tag{7.6}$$

onde Q é a intensidade da fonte (g/s), h_s é a altura da fonte (m) e δ é a função delta de Dirac.

Para corrigir a dimensionalidade do modelo proposto, adotou-se a sugestão fornecida no trabalho de Goulart *et al.* (2017), introduzindo na Eq. (7.5) dois fatores auxiliares $\phi \in \varphi$:

$$\frac{d}{dx} \to \frac{1}{\phi^{1-\alpha}} \frac{d^{\alpha}}{dx^{\alpha}} \tag{7.7}$$

$$\frac{d}{dz} \to \frac{1}{\varphi^{1-\beta}} \frac{d^{\beta}}{dz^{\beta}} \tag{7.8}$$

As relações (7.7) e (7.8) são válidas desde que os parâmetros $\phi \in \varphi$ tenham dimensões de comprimento [L] (MOREIRA; SANTOS, 2019). Assim, a representação fracionária da Eq. (7.5), a ser resolvida neste trabalho, é dada por:

$$\frac{1}{\phi^{1-\alpha}}u(z)\frac{\partial^{\alpha}c(x,z)}{\partial x^{\alpha}} = \frac{1}{\varphi^{2(1-\beta)}}\frac{\partial^{\beta}}{\partial z^{\beta}}\left(K_{z}(z)\frac{\partial^{\beta}c(x,z)}{\partial z^{\beta}}\right), \quad 0 < \alpha, \beta \leqslant 1$$
(7.9)

Nesse contexto, os parâmetros $\phi \in \varphi$ caracterizam a existência de estruturas espaciais fracionárias que preservam as unidades físicas do sistema para qualquer valor tomado para os parâmetros fracionários no intervalo definido. Além de uma descrição mais realista do processo de difusão anômala, a solução da Eq. (7.9) pelo método α -GILTT permitirá a aplicação de perfis verticais contínuos em $K_z(z) \in u(z)$.

O primeiro passo é aplicar a derivada conformável dada pela Eq. (6.3) nos termos advectivo e difusivo da Eq. (7.9), resultando:

$$u(z)\left(\frac{x}{\phi}\right)^{1-\alpha}\frac{\partial c(x,z)}{\partial x} = z^{1-\beta}\frac{\partial}{\partial z}\left[K_z(z)\left(\frac{z}{\varphi^2}\right)^{1-\beta}\frac{\partial c(x,z)}{\partial z}\right]$$
(7.10)

Com o objetivo de obter a equação auxiliar do problema de Sturm-Liouville, aplica-se a mudança de variável proposta por Crank & Park (1968), dada por:

$$X = \frac{\phi^{1-\alpha}}{\alpha} x^{\alpha} \therefore dX = \phi^{1-\alpha} x^{\alpha-1} dx$$
(7.11)

A fim de obter uma solução mais geral da Eq. (7.10), será considerada a seguinte igualdade:

$$F(z) = K_z(z) \left(\frac{z}{\varphi^2}\right)^{1-\beta} = K^{efec}$$
(7.12)

onde K^{efec} é aqui chamado de coeficiente de difusão efetivo. Assim, ao substituir as Eqs. (7.11) e (7.12) na Eq. (7.10), obtém-se:

$$u(z)\frac{\partial c(X,z)}{\partial X} = z^{1-\beta}\frac{\partial}{\partial z}\left[F(z)\frac{\partial c(X,z)}{\partial z}\right]$$
(7.13)

Para resolver a Eq. (7.13) através da técnica GILTT, o primeiro passo será determinar o problema de Sturm-Liouville associado. Para isso, será aplicada a derivada do produto no termo difusivo da Eq. (7.13) (WORTMANN *et al.*, 2005). Vale destacar que as condições de contorno nessa variável são homogêneas (fluxo nulo), e que o domínio em z é finito. Assim,

$$u(z)\frac{\partial c(X,z)}{\partial X} = z^{1-\beta} \left[\frac{\partial F(z)}{\partial z}\frac{\partial c(X,z)}{\partial z} + F(z)\frac{\partial^2 c(X,z)}{\partial z^2}\right]$$
(7.14)

Em seguida, aplica-se o problema associado à teoria de Sturm-Liouvile:

$$\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2} + \lambda_i^2 \psi_i(z) = 0 \tag{7.15}$$

$$\psi_i(z) = 0, \quad z = 0, h \tag{7.16}$$

Este problema possui a tradicional solução dada por:

$$\psi_i(z) = \cos(\lambda_i z), \text{ onde } \lambda_i = \frac{i\pi}{h}; i = 0, 1, 2, \cdots$$
 (7.17)

onde os autovalores λ_i e as autofunções $\psi_i(z)$ satisfazem as condições de ortogonalidade:

$$\frac{1}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_v \psi_i(z)\psi_j(z)dv = \begin{cases} 0 & , i \neq j \\ 1 & , i = j \end{cases}$$
(7.18)

onde N_i e N_j representam as normas das autofunções ψ_i , dada por:

$$N_i = \int_v \psi_i^2(z) dv \tag{7.19}$$

A próxima etapa é expandir a concentração c(X, z) numa série, sendo a solução final dada por:

$$c(X,z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{A_i(X)\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$$
(7.20)

onde A_i , com i = 0, 1, 2, ..., são os coeficientes desconhecidos da série. A seguir, aplica-se a Eq. (7.20) na Eq. (7.14) para determinar os coeficientes $A_i(X)$. Em seguida, multiplica-se pelo operador integral $\frac{1}{\sqrt{N_j}} \int_0^h \psi_j(z) dz$, resultando em:

$$\sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_{0}^{h} u(z) \frac{\psi_{i}(z)\psi_{j}(z)}{\sqrt{N_{i}}\sqrt{N_{j}}} dz \right) \frac{\partial A_{i}(X)}{\partial X} = \sum_{i=0}^{\infty} \left\{ \int_{0}^{h} \frac{\psi_{j}(z)}{\sqrt{N_{j}}} \left[z^{1-\beta} \frac{\partial F(z)}{\partial z} \frac{\partial \psi_{i}(z)}{\sqrt{N_{i}}} - z^{1-\beta} \lambda_{i}^{2} F(z) \frac{\psi_{i}(z)}{\sqrt{N_{i}}} \right] dz \right\} A_{i}(X) \quad (7.21)$$

Assim, reescrevendo a Eq. (7.21) na forma matricial, tem-se:

$$B\frac{\mathrm{d}A(X)}{\mathrm{d}X} + EA(X) = 0 \tag{7.22}$$

ou seja

$$\frac{\mathrm{d}A(X)}{\mathrm{d}X} + GA(X) = 0 \tag{7.23}$$

onde $A(X) = [A_0(X), A_1(X), A_2(X) \cdots]$ representa o vetor coluna dos coeficientes desconhecidos da Eq. (7.23), e G é a matriz dada por:

$$G = B^{-1}E \tag{7.24}$$

onde os elementos das matrizes $B \in E$ são, respectivamente:

$$b_{ij} = \int_0^h u(z) \frac{\psi_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz$$
 (7.25)

$$e_{ij} = \int_0^h \psi_j(z) \left[z^{1-\beta} \frac{\partial F(z)}{\partial z} \frac{\frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i N_j}} - z^{1-\beta} \lambda_i^2 F(z) \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i N_j}} \right] dz$$
(7.26)

Sem perda de generalidade, tomou-se nas equações (7.25) e (7.26) os índices $i \in j$ variando até o mesmo valor inteiro N. Desta forma, as matrizes $B \in E$ passam ser quadradas de ordem N. Esse procedimento, facilita a obtenção da inversa da matriz B garantindo que ela sempre será simétrica, positiva e definida com elementos diagonais não nulos (KUMAR; SHARAN, 2010).

A condição inicial $A_i(0)$ é obtida ao se aplicar o mesmo procedimento utilizado para expandir c(X, z), ou seja:

$$\sum_{i=0}^{\infty} A_i(0) \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} = \frac{Q}{u(z)} \delta(z - h_s)$$
(7.27)

em seguida, aplica-se o operador integral $\frac{1}{\sqrt{N_j}} \int_0^h \psi_j(z) dz$ à Eq. (7.27), resultando em:

$$\sum_{i=0}^{\infty} \int_{0}^{h} A_{i}(0) \frac{\psi_{i}(z)\psi_{j}(z)}{\sqrt{N_{i}N_{j}}} dz = \int_{0}^{h} \frac{Q}{u(z)} \delta(z-h_{s}) \frac{\psi_{j}(z)}{\sqrt{N_{j}}} dz$$
(7.28)

Aplicando as condições de ortogonalidade da Eq. (7.18) e realizando as integrações e substituições adequadas, obtém-se:

$$A_0(0) = \frac{\sqrt{h}Q\psi_0(h_s)}{\int_0^h u(z)\psi_0^2(z)dz}, \ i = 0$$
(7.29)

$$A_{i}(0) = \frac{\sqrt{\frac{h}{2}}Q\psi_{i}(h_{s})}{\int_{0}^{h}u(z)\psi_{i}^{2}(z)dz}, \ i \neq 0$$
(7.30)

A seguir, a Eq. (7.23) é resolvida aplicando-se a transformada de Laplace, em relação à variável X, e em seguida é utilizado o processo de diagonalização (SEGATTO; VILHENA, 1999), o que resulta na seguinte solução transformada:

$$s\bar{A}(s) + G\bar{A}(s) = A(0)$$
 (7.31)

$$\bar{A}(s) = W(sI + D^*)^{-1}W^{-1}A(0)$$
(7.32)

onde $G = WD^*W^{-1}$ e \overline{A} é a variável transformada $(X \to s)$. Aplicando-se a transformada inversa de Laplace na Eq. (7.32), tem-se:

$$A(X) = W \mathscr{L}^{-1} \left\{ (sI + D^*)^{-1} \right\} W^{-1} A(0)$$
(7.33)

onde \mathscr{L}^{-1} representa a transformada inversa de Laplace, A(X) a solução do sistema de EDO's, D^* representa a matriz diagonal dos autovalores, W a matriz das autofunções de

 $G,\,W^{-1}$ a sua inversa eIrepresenta a matriz identidade.

Para avaliar os elementos da matriz solução, a matriz $(sI + D^*)$ será reescrita na sua forma explícita:

$$(s.I + D^*) = \begin{pmatrix} s + d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + d_N \end{pmatrix}$$
(7.34)

onde d_i representam os autovalores da matriz G ou ainda os elementos da matriz diagonal D^* . Como a matriz $(sI + D^*)$ é diagonal, a sua inversa é dada por:

$$(s.I+D^*)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{s+d_N} \end{pmatrix}$$
(7.35)

Neste contexto, a transformada inversa de Laplace da matriz $(sI + D^*)^{-1}$ é obtida explicitamente, e dada por:

$$\mathscr{L}^{-1}\left\{ (s.I+D^*)^{-1} \right\} = \begin{pmatrix} \mathscr{L}^{-1}\left\{ \frac{1}{s+d_1} \right\} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathscr{L}^{-1}\left\{ \frac{1}{s+d_2} \right\} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathscr{L}^{-1}\left\{ \frac{1}{s+d_N} \right\} \end{pmatrix}$$
(7.36)

ou seja,

$$\mathscr{L}^{-1}\left\{ (s.I+D^*)^{-1} \right\} = \begin{pmatrix} e^{-Xd_1} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & e^{-Xd_2} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & e^{-Xd_N} \end{pmatrix}$$
(7.37)

onde X é dado por $\phi^{1-\alpha} \frac{x^{\alpha}}{\alpha}$, vide Eq. (7.11), logo:
$$\mathscr{L}^{-1}\left\{ (s.I+D^*)^{-1} \right\} = \begin{pmatrix} e^{-\phi^{1-\alpha} \left(\frac{x^{\alpha}}{\alpha}\right)d_1} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & e^{-\phi^{1-\alpha} \left(\frac{x^{\alpha}}{\alpha}\right)d_2} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & e^{-\phi^{1-\alpha} \left(\frac{x^{\alpha}}{\alpha}\right)d_N} \end{pmatrix}$$
(7.38)

A solução apresentada pela Eq. (7.20) representa um grande avanço na resolução analítica da equação de advecção-difusão fracionária conformável. Ela utiliza uma combinação do método GILTT e derivadas conformáveis, o que torna a solução obtida neste trabalho mais abrangente do que a tradicional. Embora o coeficiente de difusão considerado neste trabalho seja dependente apenas da variável z (denotado por K(z)), o mesmo procedimento pode ser aplicado para coeficientes que variam na direção vertical e longitudinal, isto é K(x, z).

7.3 Métodos numéricos de inversão da transformada de Laplace

Na literatura é possível encontrar uma série de trabalhos que evidenciam a eficácia da Transformada de Laplace na solução de equações diferenciais de ordem inteira (COHEN, 2015; ABATE; CHOUDHURY; WHITT, 2000; SCHIFF, 1999; CANNON, 2003). A técnica permite a transformação de equações diferenciais em uma forma algébrica mais simples e de fácil manipulação. No entanto, um dos principais desafios associados a essa técnica é a inversão da solução transformada, especialmente quando a sua inversa não está tabulada, o que requer o cálculo da integral de Bromwich no plano complexo. Apesar do poder da análise complexa, esse procedimento pode se tornar complicado do ponto de vista analítico, visto que determinar a localização e natureza das singularidades pode ser difícil em muitas situações (PIESSENS, 1971). Neste contexto, torna-se necessário o uso de métodos numéricos para obter a transformada inversa de Laplace, e na literatura, existem diversas técnicas disponíveis. Para problemas relacionados à dispersão de poluentes, os métodos Fixed Talbot (ABATE; VALKÓ, 2004) e Quadratura Gaussiana (STROUD; SECREST, 1966) são frequentemente adotados com sucesso. Neste trabalho, a fim de determinar a melhor técnica de inversão, empregaram-se tanto o método da Quadratura Gaussiana quanto o Fixed Talbot.

7.3.1 Inversão numérica por Quadratura Gaussiana

A quadratura Gaussiana é um método de integração numérica que possibilita a estimativa da solução de uma integral definida. Esse método envolve a seleção de pontos específicos

no domínio de integração, aos quais são atribuídos pesos, onde a função é avaliada. Ao utilizar esse método, realiza-se uma aproximação da integral por meio de um somatório, no qual os pesos (ou coeficientes de ponderação) e os pontos de quadratura estão intimamente interligados (BURDEN; FAIRES, 2011).

Na regra da quadratura Gaussiana, supõe-se que as funções f(x) e w(x) são conhecidas e definidas em um intervalo [a, b], bem como no conjunto de pontos $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$. Com base nesses elementos, a integração numérica por aproximação pode ser obtida da seguinte forma:

$$I(f) = \int_{a}^{b} f(x)w(x)dx = \sum_{k=1}^{n} w_{k}f(x_{k})$$
(7.39)

onde, $w_k \in x_k$ são os pesos e seus respectivos pontos.

O cálculo da transformada inversa empregando esta regra tem o mesmo princípio básico, no qual a integral complexa de inversão pode ser expressa em termos da soma de suas partes. Segundo Stroud & Secrest (1966), a inversão numérica da transformada de Laplace via quadratura gaussiana é dada pela seguinte fórmula:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} e^p \frac{F(p)}{p} dp = \sum_{n=1}^N A_n F(p_n)$$
(7.40)

onde *i* representa a unidade imaginária, c' é um número real positivo arbitrário e F(p) é uma função analítica no semi-plano direito do plano complexo. As abscissas p_n e pesos $A_n \operatorname{com} n = 1, 2, 3, ..., N$ são obtidas de forma que a Eq. (7.40) seja exata sempre que a função F(p) é um polinômio de 1/s com grau menor ou igual à 2N - 1. Neste ponto, a fórmula de integração gaussiana obtida, terá um grau de precisão de 2N - 1. De acordo com (HEYDARIAN; ABAZARI; HOSEINI, 1981) as abcissas p_n são obtidas calculando as raízes do seguinte polinômio

$$(-1)^{N} \sum_{r=0}^{N} \frac{(-1)^{N} N(N+r-1)!}{r! (N-r)!} p^{N-r} = 0$$
(7.41)

e os pesos A_n da Eq. (7.40) podem ser calculados através da solução de

$$\sum_{n=1}^{N} A_n p_n^{-r} = \frac{1}{r!}, \ 0 \leqslant r \leqslant N - 1$$
(7.42)

Não obstante, a transformada inversa de Laplace de uma função U(s), pode ser obtida pela integral de Bromwich, dada por

$$\varpi(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} U(s) ds \tag{7.43}$$

onde γ é escolhido de maneira que todos os pontos singulares de U(s) estejam à esquerda de $Re(s) = \gamma > 0$ no plano no complexo. Para aplicar a fórmula de quadratura definida pela Eq. (7.40), propõe-se uma mudança de variável na Eq. (7.43), dada por:

$$st = p \tag{7.44}$$

e desta forma obtém-se

$$t\varpi(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^p U\left(\frac{p}{t}\right) dp$$
(7.45)

ao reescrever a equação (7.45), obtém-se:

$$t\varpi(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^p \frac{F(p)}{p} dp$$
(7.46)

onde $F(p) = pU\left(\frac{p}{t}\right)$. Desta forma, a função F(p) presente na fórmula de quadratura Gaussiana (7.40) está relacionada com a função a ser invertida U(s) por meio da expressão:

$$F(p) = \frac{p}{t}U\left(\frac{p}{t}\right) \tag{7.47}$$

onde t é a variável que se deseja obter a inversão.

Neste contexto, é possível obter uma aproximação numérica da integral de Bromwich usando a técnica de quadratura Gaussiana. Portanto, a transformada inversa de Laplace da função U(s) é obtida da seguinte forma:

$$u(t) = \{U(s)); s \to t\} = \sum_{i=1}^{n} A_i\left(\frac{p_i}{t}\right) U\left(\frac{p_i}{t}\right)$$
(7.48)

onde p_i são as raízes da quadratura e A_i são os pesos, como descritos anteriormente. Vale ressaltar que os pesos A_i e as raízes p_i são números complexos e encontram-se tabulados nos trabalhos de Salzer (1955), Salzer (1961) e Stroud & Secrest (1966).

7.3.2 Inversão numérica pelo método Fixed Talbot

O método *Fixed Talbot* (FT) é uma técnica numérica robusta e de fácil implementação, utilizada para calcular aproximações da transformada inversa de Laplace (ABATE; VALKÓ, 2004; VALKÓ; ABATE, 2004; TALBOT, 1979). Como já foi mencionado, um dos principais desafios na obtenção da transformada inversa de Laplace reside no cálculo da integral de Bromwich, dada por:

$$F(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_c - i\infty}^{\gamma_c + i\infty} e^{st} F(s) \, ds \tag{7.49}$$

Isso ocorre porque, na maioria das vezes, essas integrais não possuem solução analítica fechada para determinadas funções, o que dificulta o processo de obtenção da transformada inversa. Portanto, torna-se necessário aplicar métodos numéricos.

O princípio fundamental do método *Fixed Talbot* consiste em alterar o contorno da integral (7.49). Originalmente, esse contorno é representado por uma linha vertical, definida por $s = \gamma_c + iy_c$, onde $-\infty < y_c < +\infty$ e o valor de γ_c assume um valor fixo de forma a garantir que todas as singularidades da transformação estejam à esquerda dele. Neste sentido, é possível deformar o contorno em qualquer trajetória aberta que envolva o eixo real negativo, desde que não cruze nenhuma singularidade de F(s) durante essa deformação do contorno. A deformação do contorno facilita a convergência da integral de Bromwich, uma vez que s torna-se grande e negativo, fazendo com que o termo e^{st} na integral se torne muito pequeno.

Dessa forma, Talbot (1979) apresenta uma inovação ao sugerir uma parametrização específica para este contorno modificado, expressa da seguinte maneira:

$$S(\theta_k) = r\theta \left(\cot(\theta) + i \right), \quad -\pi < \theta < \pi \tag{7.50}$$

onde $\theta_k = \frac{k\pi}{M^*}$ e r é un parâmetro determinado a partir de experimentos numéricos e é dado por $r = \frac{2M^*}{pt}$. O valor de p é estabelecido por meio de simulações numéricas que avaliam a convergência do modelo.

Dessa forma, a transformada inversa de Laplace da concentração $c(x, z, s) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(x, s)\psi_i(z)$

é determinada como segue:

$$c(x,z,t) = \frac{r}{M^*} \left\{ \frac{1}{2} c(x,z,s) e^{rt} + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re}\left[e^{tS(\theta_k)} c(x,z,S(\theta_k))(1+i\sigma(\theta_k)) \right] \right\}$$
(7.51)

onde $\sigma(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot(\theta_k) - 1) \cot(\theta_k).$

Conforme indicado por Abate & Valkó (2004), o algoritmo FT proporciona resultados com uma precisão de até M^* dígitos significativos. Neste contexto, M^* denota o número de termos do somatório do algoritmo FT.

7.4 Solução da equação de advecção-difusão bidimensional transiente conformável

Nesta seção, são propostas duas soluções da equação de advecção-difusão transiente bidimensional conformável. A primeira conta com derivadas conformáveis nos termos transiente e advectivo da equação de advecção-difusão bidimensional transiente, enquanto a segunda incorpora derivadas conformáveis em todos os termos derivativos. Adicionalmente, neste estudo, duas condições de fonte distintas foram utilizadas: uma contínua e outra de curta duração.

7.4.1 Modelo com derivadas conformáveis nos termos transiente e advectivo da equação

Neste tópico, será abordada a resolução da equação de advecção-difusão conformável bidimensional transiente, por meio da aplicação do método α -GILTT. Para tanto, a estrutura matemática da equação clássica de advecção-difusão, representada pela Eq. (7.4), foi modificada por meio da inserção de operadores fracionários nos termos transiente e advectivo (GOULART *et al.*, 2017; MOREIRA; MORET, 2018). A equação resultante é expressa por:

$$\frac{\partial^{\alpha}c(x,z,t)}{\partial t^{\alpha}} + u(z)\frac{\partial^{\beta}c(x,z,t)}{\partial x^{\beta}} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(z)\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial z}\right) \quad 0 < \alpha, \beta \leqslant 1$$
(7.52)

para 0 < z < h, $0 \leq x < \infty$, e $t \geq 0$, onde h é a altura da CLP, u(z) é o perfil vertical da velocidade do vento na direção longitudinal, c é a concentração integrada lateralmente do poluente passivo, K(z) é o coeficiente de difusão vertical, e α e β são as ordens do

operador fracionário. A Eq. (7.52) está sujeita às seguintes condições de contorno:

$$K(z)\frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad z = 0, h \tag{7.53}$$

com condição inicial,

$$c(x, z, 0) = 0, \quad t = 0 \tag{7.54}$$

e a seguinte condição de fonte,

$$c(0, z, t) = \frac{Q}{u(z)}\delta(z - h_s), \quad x = 0$$
(7.55)

onde Q é a intensidade da fonte, h_s é a altura da fonte e δ é a função delta de Dirac. O primeiro passo consiste em aplicar a derivada conformável na Eq. (7.52) nos termos transiente e advectivo, obtendo-se:

$$t^{1-\alpha}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial t} + u(z)x^{1-\beta}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(z)\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial z}\right)$$
(7.56)

ou seja

$$\frac{1}{t^{\alpha-1}}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial t} + u(z)\frac{1}{x^{\beta-1}}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(z)\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial z}\right)$$
(7.57)

A fim de que a transformada de Laplace e o problema auxiliar de Sturm-Liouville possam ser aplicados, a mudança de variável proposta por Crank & Park (1968) é adotada, conforme apresentado a seguir:

$$X = \frac{x^{\beta}}{\beta} \therefore dX = x^{\beta - 1} dx \tag{7.58}$$

$$T = \frac{t^{\alpha}}{\alpha} \therefore dT = t^{\alpha - 1} dt \tag{7.59}$$

Dessa forma, ao substituir as Eq. (7.58) e Eq. (7.59) na Eq. (7.57), obtém-se:

$$\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial T} + u(z)\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(z)\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial z}\right)$$
(7.60)

Em seguida, aplica-se a transformada de Laplace na Eq. (7.60) em relação à variável temporal T:

$$s\bar{c}(X,z,s) - \bar{c}(X,z,0) + u(z)\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(z)\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial z}\right)$$
(7.61)

onde \bar{c} é a concentração transformada $(T \to s)$.

Para resolver a Eq. (7.61) com a técnica GILTT na variável z, é necessário aplicar a derivada do produto no termo difusivo. É importante ressaltar que, para isso, as condições de contorno nesta variável devem ser homogêneas e que o domínio em z deve ser finito, resultando em:

$$s\bar{c}(X,z,s) - \bar{c}(X,z,0) + u(z)\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial X} = \frac{\partial K(z)}{\partial z}\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial z} + K(z)\frac{\partial^2\bar{c}(X,z,s)}{\partial z^2}$$
(7.62)

Em seguida, aplica-se o problema associado à teoria de Sturm-Liouvile:

$$\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2} + \lambda_i^2 \psi_i(z) = 0 \quad 0 < z < h \tag{7.63}$$

$$\psi_i(z) = 0, \quad z = 0, h \tag{7.64}$$

cuja solução é:

$$\psi_i(z) = \cos(\lambda_i z), \text{ onde } \lambda_i = \frac{i\pi}{h}; i = 0, 1, 2, \cdots$$
 (7.65)

onde os autovalores λ_i e as autofunções $\psi_i(z)$ satisfazem as condições de ortogonalidade:

$$\frac{1}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_v \psi_i(z)\psi_j(z)dv = \begin{cases} 0 & , i \neq j \\ 1 & , i = j \end{cases}$$
(7.66)

em que N_i denota as normas das autofunções $\psi_i,$ que são dadas por:

$$N_i = \int_v \psi_i^2(z) dv \tag{7.67}$$

O próximo passo é expandir a concentração \bar{c} em uma série, dada por:

$$\bar{c}(X,z,s) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$$
(7.68)

e substituir na Eq. (7.62), resultando em:

$$s\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + u(z)\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \frac{\partial \overline{\bar{c}_i(X,s)}}{\partial X} = \frac{\partial K(z)}{\partial z}\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}\frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}} + K(z)\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2}}{\sqrt{N_i}}$$
(7.69)

Como $\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2} = -\lambda_i^2 \psi_i(z)$, substitui-se na Eq. (7.69), o que resulta em:

$$s\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\overline{c_i}(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + u(z)\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \frac{\partial \overline{\overline{c_i}(X,s)}}{\partial X} = \frac{\partial K(z)}{\partial z}\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\overline{c_i}(X,s)}\frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}} - K(z)\sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 \frac{\overline{\overline{c_i}(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$$
(7.70)

Em seguida, aplica-se na Eq. (7.70) o operador integral:

$$\frac{1}{\sqrt{N_j}} \int_0^h \psi_j(z) dz \tag{7.71}$$

resultando em,

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \frac{\partial \overline{\bar{c}_i(X,s)}}{\partial X} \int_0^h u(z)\psi_i(z)\psi_j(z)dz + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_0^h (s+\lambda_i^2 K(z))\psi_i(z)\psi_j(z)dz - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_0^h \frac{\partial K(z)}{\partial z} \frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z}\psi_j(z)dz = 0$$
(7.72)

Reescrevendo a Eq. (7.72) na forma matricial, obtém-se:

$$P\frac{\partial Y(X,s)}{\partial X} + FY(X,s) = 0 \tag{7.73}$$

onde $Y(X,s) = \left[\overline{\overline{c}_1(X,s)}, \overline{\overline{c}_2(X,s)}, \overline{\overline{c}_3(X,s)} \cdots\right]$ representa o vetor coluna dos coeficientes desconhecidos da Eq. (7.73), e os elementos das matrizes $P \in F$ são, respectivamente:

$$p_{ij} = \frac{1}{\sqrt{N_i N_j}} \int_0^h u(z) \psi_i(z) \psi_j(z) dz$$
(7.74)

$$f_{ij} = \frac{1}{\sqrt{N_i N_j}} \left[\int_0^h (s + \lambda_i^2 K(z)) \psi_i(z) \psi_j(z) dz - \int_0^h \frac{\partial K(z)}{\partial z} \frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z} \psi_j(z) dz \right]$$
(7.75)

Sem perda de generalidade, tomou-se nas Eqs. (7.74) e (7.75) os índices $i \in j$ variando até o mesmo valor inteiro N. Desta forma, as matrizes $P \in F$ passam ser quadradas de ordem N. Esse procedimento facilita a obtenção da inversa da matriz P garantindo que ela sempre será simétrica, positiva e definida com elementos diagonais não nulos (KUMAR; SHARAN, 2010). Para calcular as integrais presentes nas matrizes $P \in F$ é utilizado o método de quadratura de Gauss-Legendre.

Assumindo que $H = P^{-1}F$, tem-se,

$$\frac{\partial Y(X,s)}{\partial X} + HY(X,s) = 0 \tag{7.76}$$

Para obter a condição necessária para a solução da Eq. (7.76), aplica-se a transformada de Laplace na condição de fonte em relação à variável T, ou seja:

$$\bar{c}(0,z,s) = \frac{Q\delta(z-h_s)}{u(z)}\frac{1}{s}$$
(7.77)

e em seguida, aplica-se a GITT na Eq. (7.77), e a variável \bar{c} é então expandida,

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\psi_i(z)\overline{\overline{c}(0,s)}}{\sqrt{N_i}} = \frac{Q\delta(z-h_s)}{u(z)}\frac{1}{s}$$
(7.78)

Logo após, aplica-se o operador transformada integral (vide Eq. 7.71), obtendo-se,

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(0,s)}}{\sqrt{N_i N_j}} \int_0^h \psi_i(z) \psi_j(z) dz = \frac{Q}{\sqrt{N_j}} \frac{1}{s} \int_0^h \frac{\delta(z-h_s)\psi_j(z)}{u(z)}$$
(7.79)

Assim, resolvendo-se a integral e aplicando-se as simplificações possíveis, obtém-se a condição de fonte,

$$Y(0,s) = \frac{1}{s} \frac{Q\psi_j(h_s)}{u(h_s)\sqrt{N_j}}$$
(7.80)

A seguir, a Eq. (7.76) é resolvida aplicando-se a transformada de Laplace na variável X $(X \rightarrow r)$,

$$r\bar{Y}(r,s) - Y(0,s) + H\bar{Y}(r,s) = 0$$
 (7.81)

ou seja,

$$r\bar{Y}(r,s) + H\bar{Y}(r,s) = Y(0,s)$$
 (7.82)

Assumindo que a matriz H é não-defectiva, emprega-se o processo de diagonalização e decompõe-se a matriz H na forma:

$$H = GD^*G^{-1} (7.83)$$

onde D^* é a matriz diagonal de autovalores de H, e G é a matriz diagonal dos respectivos autovetores. Assim, a Eq. (7.82) assume a seguinte forma:

$$r\bar{Y}(r,s) + GD^*G^{-1}\bar{Y}(r,s) = Y(0,s)$$
 (7.84)

Rearranjando a Eq. (7.84), tem-se:

$$(rI + GD^*G^{-1})\bar{Y}(r,s) = Y(0,s)$$
 (7.85)

onde I é a matriz identidade. Por conveniência, pode-se reescrever I como GG^{-1} e assim, a Eq. (7.85) assume a forma:

$$\left(rGG^{-1} + GD^*G^{-1}\right)\bar{Y}(r,s) = Y(0,s)$$
(7.86)

ou seja,

$$G(rI + D^*) G^{-1} \bar{Y}(r, s) = Y(0, s)$$
(7.87)

Ao multiplicar ambos os lados da Eq. (7.87) por $G\left(rI+D^*\right)^{-1}G^{-1}$, tem-se:

$$\bar{Y}(r,s) = G \left(rI + D^* \right)^{-1} G^{-1} Y(0,s)$$
(7.88)

Aplicando-se a transformada inversa de Laplace, aqui representada por \mathscr{L}_r^{-1} , na Eq. (7.88), obtém-se:

$$\mathscr{L}_{r}^{-1}\left\{\bar{Y}(r,s)\right\} = \mathscr{L}_{r}^{-1}\left\{G\left(rI + D^{*}\right)^{-1}G^{-1}Y(0,s)\right\}$$
(7.89)

Como $G \in Y(0,s)$ são constantes em r, tem-se,

$$Y(X,s) = G\mathscr{L}_r^{-1}\left\{ (rI + D^*)^{-1} \right\} G^{-1} Y(0,s)$$
(7.90)

com o objetivo de avaliar os elementos da matriz solução, a matriz $(rI + D^*)$ será reescrita na sua forma explícita:

$$(r.I + D^*) = \begin{pmatrix} r + d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r + d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r + d_N \end{pmatrix}$$
(7.91)

onde $(rI + D^*)$ é uma matriz diagonal, cujos elementos da diagonal principal são $r + d_i$, sendo d_i os autovalores da matriz H. Como a matriz $(rI + D^*)$ é diagonal, a sua inversa é dada por:

$$(r.I+D^*)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{r+d_1} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \frac{1}{r+d_2} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{r+d_N} \end{pmatrix}$$
(7.92)

Neste contexto, a transformada inversa de Laplace da matriz $(rI + D^*)^{-1}$ é obtida explicitamente, e dada por:

$$\mathscr{L}_{r}^{-1}\left\{\left(r.I+D^{*}\right)^{-1}\right\} = \begin{pmatrix} \mathscr{L}_{r}^{-1}\left\{\frac{1}{r+d_{1}}\right\} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \mathscr{L}_{r}^{-1}\left\{\frac{1}{r+d_{2}}\right\} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \mathscr{L}_{r}^{-1}\left\{\frac{1}{r+d_{N}}\right\} \end{pmatrix}$$
(7.93)

ou seja,

$$J^{*}(X) = \mathscr{L}_{r}^{-1} \left\{ (r.I + D^{*})^{-1} \right\} = \begin{pmatrix} e^{-Xd_{1}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-Xd_{2}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{-Xd_{N}} \end{pmatrix}$$
(7.94)

onde X é dado por $\frac{x^{\beta}}{\beta}$ (vide Eq. (7.58)). Logo:

$$J^{*}(x) = \mathscr{L}^{-1}\left\{ (r.I + D^{*})^{-1} \right\} = \begin{pmatrix} e^{\frac{-x^{\beta}}{\beta}d_{1}} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & e^{\frac{-x^{\beta}}{\beta}d_{2}} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & e^{\frac{-x^{\beta}}{\beta}d_{N}} \end{pmatrix}$$
(7.95)

Finalmente, a solução do problema transformado, descrito na Eq. (7.85), é obtida pela substituição da matriz, obtida na Eq. (7.95), na Eq. (7.90),

$$Y(x,s) = GJ^*(x)G^{-1}Y(0,s)$$
(7.96)

No intuito de evitar a inversão da matriz G, adotou-se o procedimento descrito no trabalho de Segatto & Vilhena (1999). Dessa forma, a Eq. (7.96) pode ser reescrita como:

$$Y(x,s) = GJ^{*}(x)\xi^{*}$$
(7.97)

onde os valores dos vetores ξ^* são obtidos resolvendo o sistema linear $G\xi^* = Y(0, s)$ via decomposição LU. Uma vez que o vetor Y(x, s) foi obtido, é possível encontrar a concentração do poluente $\bar{c}(x, z, T)$. Neste estudo, para identificar a técnica de inversão mais eficaz, foi empregado o método da Quadratura Gaussiana e o *Fixed Talbot*. Ao aplicar a transformada inversa de Laplace utilizando a quadratura de Gauss, conforme descrito na Eq. (7.48), obtém-se:

$$c(x,z,T) = \sum_{k=1}^{M} A_k\left(\frac{p_k}{T}\right) \sum_{i=0}^{N} \frac{\bar{c}\left(x,\frac{p_k}{T}\right)\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$$
(7.98)

onde T é dado por $\frac{t^{\alpha}}{\alpha}$, vide Eq. (7.59). Logo,

$$c(x,z,t) = \sum_{k=1}^{M} A_k \left(\frac{\alpha p_k}{t^{\alpha}}\right) \sum_{i=0}^{N} \frac{\bar{c}\left(x,\frac{\alpha p_k}{t^{\alpha}}\right)\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$$
(7.99)

onde A_k e P_k são, respectivamente, os pesos e os pontos de colocação da quadratura de Gauss, e M o número de pontos de quadratura.

De forma similar, ao aplicar o método de inversão Fixed Talbot, descrito pela Eq. (7.51), para a concentração $c(x, z, s) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(x, s)\psi_i(z)$, obtém-se:

$$c(x,z,T) = \frac{r}{M^*} \left\{ \frac{1}{2} c(x,z,s) e^{rT} + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re}\left[e^{TS(\theta_k)} c(x,z,S(\theta_k)) (1+i\sigma(\theta_k)) \right] \right\}, \quad (7.100)$$

onde T é representado por $\frac{t^{\alpha}}{\alpha}$, conforme a Eq. (7.59). Assim,

$$c(x,z,t) = \frac{r}{M^*} \left\{ \frac{1}{2} c(x,z,s) e^{\frac{rt^{\alpha}}{\alpha}} + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re}\left[e^{\frac{t^{\alpha}S(\theta_k)}{\alpha}} c(x,z,S(\theta_k))(1+i\sigma(\theta_k)) \right] \right\}.$$
 (7.101)

onde M^* denota o número de termos do somatório do algoritmo FT.

7.4.2 Modelo com derivadas conformáveis em todos os termos derivativos da equação.

Nesta seção, será apresentada a solução da equação bidimensional transiente de advecçãodifusão conformável, com a inclusão de derivadas conformáveis em todos os termos derivativos, por meio da aplicação do método α -GILTT. Neste sentido, a estrutura matemática da equação clássica de advecção-difusão, como mostrada na Eq. (7.4), foi modificada pela introdução de derivadas confomes em todos os termos derivativos da equação (GOULART *et al.*, 2017; MOREIRA; MORET, 2018). A equação obtida pode ser expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial^{\alpha}c(x,z,t)}{\partial t^{\alpha}} + u(z)\frac{\partial^{\beta}c(x,z,t)}{\partial x^{\beta}} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(z)\frac{\partial^{\gamma}c(x,z,t)}{\partial z^{\gamma}}\right) \quad 0 < \alpha, \beta, \gamma \leqslant 1$$
(7.102)

para 0 < z < h, $0 \leq x < \infty$, e $t \geq 0$, onde h é a altura da CLP, u é o perfil vertical da velocidade do vento na direção longitudinal, c é a concentração integrada lateralmente do poluente passivo, K(z) é o coeficiente de difusão vertical e α , β e γ são as ordens dos operadores fracionários. A Eq. (7.102) está sujeita às seguintes condições de contorno:

$$K(z)\frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad z = 0, h \tag{7.103}$$

com condição inicial,

$$c(x, z, 0) = 0, \quad t = 0$$
 (7.104)

e as seguintes condições de fonte:

a)fonte contínua:

$$c(0, z, t) = \frac{Q}{u(z)}\delta(z - h_s), \quad x = 0$$
(7.105)

b)fonte de curta duração:

$$c(0,z,t) = \frac{Q}{u(z)} \left[\eta(t) - \eta(t-t_r) \right] \delta(z-h_s), \quad x = 0$$
(7.106)

onde Q é a intensidade da fonte, h_s é a altura da fonte e δ é a função delta de Dirac, η é a função de Heaviside e t_r é a duração da liberação.

O primeiro passo, consiste em aplicar a derivada conformável à Eq. (7.102) nos termos transiente, advectivo e difusivo, obtendo-se:

$$t^{1-\alpha}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial t} + u(z)x^{1-\beta}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(z)z^{1-\gamma}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial z}\right)$$
(7.107)

ou seja

$$\frac{1}{t^{\alpha-1}}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial t} + u(z)\frac{1}{x^{\beta-1}}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{K(z)}{z^{\gamma-1}}\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial z}\right)$$
(7.108)

Para aplicar a transformada de Laplace e o problema auxiliar de Sturm-Liouvile, é adotada a mudança de variável proposta por Crank & Park (1968), dada por:

$$X = \frac{x^{\beta}}{\beta} \therefore dX = x^{\beta - 1} dx \tag{7.109}$$

$$T = \frac{t^{\alpha}}{\alpha} \therefore dT = t^{\alpha - 1} dt \tag{7.110}$$

Dessa forma, ao substituir as Eq. (7.109) e Eq. (7.110) na Eq. (7.108), obtém-se:

$$\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial T} + u(z)\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{K(z)}{z^{\gamma-1}}\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial z}\right)$$
(7.111)

A fim de obter-se uma solução mais geral da Eq. (7.111) será levada em conta a seguinte igualdade:

$$F(z) = \frac{K(z)}{z^{\gamma - 1}} = K^{efec}$$
(7.112)

onde K^{efec} é aqui denominado de coeficiente de difusão efetivo. Assim, ao substituir a Eq. (7.112) na Eq. (7.111), obtém-se:

$$\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial T} + u(z)\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial z}\left(F(z)\frac{\partial c(X,z,T)}{\partial z}\right)$$
(7.113)

Em seguida aplica-se a transformada de Laplace na Eq. (7.113) em relação à variável temporal T:

$$s\bar{c}(X,z,s) - \bar{c}(X,z,0) + u(z)\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial z}\left(F(z)\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial z}\right)$$
(7.114)

onde \bar{c} é a concentração transformada $(T \to s)$.

Para resolver a Eq. (7.114) com a técnica GILTT na variável z, é necessário aplicar a derivada do produto no termo difusivo. Vale destacar que as condições de contorno nesta variável devem ser homogêneas e que o domínio em z é finito, resultando em:

$$s\bar{c}(X,z,s) - \bar{c}(X,z,0) + u(z)\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial X} = \frac{\partial F(z)}{\partial z}\frac{\partial\bar{c}(X,z,s)}{\partial z} + F(z)\frac{\partial^2\bar{c}(X,z,s)}{\partial z^2}$$
(7.115)

Em seguida, aplica-se o problema associado à teoria de Sturm-Liouvile:

$$\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2} + \lambda_i^2 \psi_i(z) = 0 \quad 0 < z < h \tag{7.116}$$

$$\psi_i(z) = 0, \ z = 0, h$$
 (7.117)

cuja solução é:

$$\psi_i(z) = \cos(\lambda_i z), \text{ onde } \lambda_i = \frac{i\pi}{h}; i = 0, 1, 2, \cdots$$
 (7.118)

onde os autovalores λ_i e $\psi_i(z)$ as autofunções satisfazem as condições de ortogonalidade:

$$\frac{1}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_v \psi_i(z)\psi_j(z)dv = \begin{cases} 0 & , i \neq j \\ 1 & , i = j \end{cases}$$
(7.119)

onde N_i representa as normas das autofunções $\psi_i,$ dada por:

$$N_i = \int_v \psi_i^2(z) dv \tag{7.120}$$

O próximo passo é expandir a concentração \bar{c} em uma série, dada por:

$$\bar{c}(X,z,s) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$$
(7.121)

e substituir na Eq. (7.115), obtendo-se:

$$s\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + u(z)\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \frac{\partial \overline{c_i(X,s)}}{\partial X} = \frac{\partial F(z)}{\partial z}\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(X,s)}\frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}} + F(z)\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(X,s)}\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2}}{\sqrt{N_i}}$$
(7.122)

Como $\frac{\partial^2 \psi_i(z)}{\partial z^2} = -\lambda_i^2 \psi_i(z)$, substitui-se na Eq. (7.122), o que resulta em:

$$s\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\overline{c_i}(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + u(z)\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \frac{\partial \overline{\overline{c_i}(X,s)}}{\partial X} = \frac{\partial F(z)}{\partial z}\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\overline{c_i}(X,s)}\frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}}$$
$$-F(z)\sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 \frac{\overline{\overline{c_i}(X,s)}\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}$$
(7.123)

Em seguida, aplica-se na Eq. (7.123) o operador integral:

$$\frac{1}{\sqrt{N_j}} \int_0^h \psi_j(z) dz \tag{7.124}$$

resultando em

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \frac{\partial \overline{\bar{c}_i(X,s)}}{\partial X} \int_0^h u(z)\psi_i(z)\psi_j(z)dz + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_0^h (s+\lambda_i^2 F(z))\psi_i(z)\psi_j(z)dz - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(X,s)}}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_0^h \frac{\partial F(z)}{\partial z} \frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z}\psi_j(z)dz = 0$$
(7.125)

Reescrevendo-se a Eq. (7.125) na forma matricial, obtém-se:

$$A\frac{\partial Y(X,s)}{\partial X} + BY(X,s) = 0$$
(7.126)

onde $Y(X, s) = \left[\overline{c_1(X, s)}, \overline{c_2(X, s)}, \overline{c_3(X, s)} \cdots\right]$ representa o vetor coluna dos coeficientes desconhecidos da Eq. (7.126), e os elementos das matrizes $A \in B$ são, respectivamente:

$$a_{ij} = \frac{1}{\sqrt{N_i N_j}} \int_0^h u(z) \psi_i(z) \psi_j(z) dz$$
(7.127)

$$b_{ij} = \frac{1}{\sqrt{N_i N_j}} \left[\int_0^h (s + \lambda_i^2 F(z)) \psi_i(z) \psi_j(z) dz - \int_0^h \frac{\partial F(z)}{\partial z} \frac{\partial \psi_i(z)}{\partial z} \psi_j(z) dz \right]$$
(7.128)

Sem perda de generalidade, tomou-se nas Eqs. (7.127) e (7.128) os índices *i* e *j* variando até o mesmo valor inteiro *N*. Desta forma, as matrizes *A* e *B* passam ser quadradas de ordem *N*. Esse procedimento facilita a obtenção da inversa da matriz *A* garantindo que ela sempre será simétrica, positiva e definida com elementos diagonais não nulos (KUMAR; SHARAN, 2010). Para calcular as integrais presentes nas matrizes *A* e *B* é utilizado o método de quadratura de Gauss-Legendre. Tomando $\vartheta = A^{-1}B$, tem-se,

$$\frac{\partial Y(X,s)}{\partial X} + \vartheta Y(x,s) = 0 \tag{7.129}$$

Neste estudo, duas condições de fonte foram empregadas: uma contínua e outra de curta duração, a fim de que a condição inicial necessária para a solução da Eq. (7.129) fosse obtida. Para a fonte contínua, será aplicada a Eq. (7.80) obtida na seção 7.4. Para a fonte de curta duração, a condição inicial foi determinada seguindo o procedimento da GITT.

Inicialmente, a transformada de Laplace foi aplicada em relação à variável t, ou seja:

$$\bar{c}(0,z,s) = \frac{Q\delta(z-h_s)}{u(z)} \left(\frac{1-e^{-st_r}}{s}\right)$$
(7.130)

e em seguida, aplica-se a GITT na Eq. (7.130), e a variável \bar{c} é então expandida,

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\psi_i(z)\overline{\overline{c}(0,s)}}{\sqrt{N_i}} = \frac{Q\delta(z-h_s)}{u(z)} \left(\frac{1-e^{-st_r}}{s}\right)$$
(7.131)

Logo após, aplica-se o operador transformada integral (dado pela Eq. 7.124), obtendo-se,

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(0,s)}}{\sqrt{N_i N_j}} \int_0^h \psi_i(z) \psi_j(z) dz = \frac{Q}{\sqrt{N_j}} \left(\frac{1 - e^{-st_r}}{s}\right) \int_0^h \frac{\delta(z - h_s) \psi_j(z)}{u(z)} dz$$
(7.132)

Assim, ao resolver a integral e aplicar as simplificações possíveis, a condição de fonte é obtida

$$Y(0,s) = \left(\frac{1 - e^{-st_r}}{s}\right) \frac{Q\psi_j(h_s)}{u(h_s)\sqrt{N_j}}$$
(7.133)

Finalmente, o problema representado pela Eq. (7.129) pode ser resolvido usando a técnica da Transformada de Laplace combinada com a diagonalização, conforme descrito por

Segatto & Vilhena (1999) e apresentado na seção 7.4.

Experimentos, Parametrizações e Métodos Estatísticos Aplicados na Validação dos Modelos

Com o objetivo de verificar a validade dos modelos matemáticos propostos neste trabalho, os dados experimentais de Copenhagen (GRYNING; LYCK, 1984) e de Prairie Grass (BARAD, 1958) serão utilizados como base para comparar com os resultados gerados pelas soluções obtidas no Capítulo sete. Além disso, a avaliação estatística da performance dos modelos será conduzida por meio do procedimento de bootstrap, conforme descrito por Hanna (1989). Nesse processo, serão comparados os dados simulados com os dados observados.

8.1 Experimento de Copenhagen

Os experimentos de dispersão atmosférica de Copenhagen foram conduzidos na cidade de Gladsaxe, situado ao norte da cidade de Copenhagen. Durante os ensaios, o traçador químico Hexafluoreto de Enxofre (SF_6) foi liberado a uma vazão constante sem empuxo de uma torre de TV com altura de 115 metros, em condições atmosféricas neutras e instáveis. A taxa de vazão do traçador variou de 2, 4 a 4, 7 $g.s^{-1}$ em diferentes experimentos. As amostras foram coletadas no nível do solo (z = 2m) por 60 coletores posicionados em três arcos concêntricos perpendiculares à direção dos ventos médios, em distâncias radiais de 2, 4 e 6 km. Na Figura 8.1, é possível observar que cada arco continha aproximadamente 20 unidades de amostragem, representadas por círculos.



Figura 8.1: Representação esquemática do experimento de Copenhagen. As posições das unidades de amostragem do rastreador estão representadas na ilustração através de círculos.

O traçador (SF_6) foi liberado uma hora antes do início do processo de coleta nas fontes de amostragem, e o tempo médio de exposição dos receptores foi de 1 hora. A área onde o experimento foi conduzido era predominantemente residencial, com comprimento de rugosidade de 0,6 m. Durante os experimentos, foram realizadas medições meteorológicas, incluindo coleta de dados por radiossondas, registro das flutuações tridimensionais da velocidade do vento na altura da liberação e medições do perfil médio do vento e da temperatura na área de liberação. A partir dos dados resultantes dessas medições, foram derivados os valores da velocidade média do vento na altura da liberação, a altura de mistura e os comprimentos de Obukhov (GRYNING, 1981).

Durante o processo de coleta, amostradores automáticos foram utilizados para coletar três amostras de ar, cada uma delas armazenada em um saco individual. Cada amostra foi coletada por 20 minutos, totalizando aproximadamente uma hora de tempo de amostragem. As amostras coletadas foram posteriormente analisadas por cromatógrafo a gás com detector de captura de elétrons. Abaixo, as Tabelas 8.1 e 8.2 apresentam, respectivamente, os dados meteorológicos e as concentrações máximas observadas durante o experimento.

		•	17 .	1 1	•	1 0	1
Tabela 8.1:	Parametros	micrometeor	ológicos (dos Ex	xperimentos	de Co	penhagen
					-p		P0

Experimento	$\bar{u}(m/s)$	$u_*(m/s)$	L(m)	$w_*(m/s)$	h(m)
1	3,4	0,37	-46	18	1980
2	1,6	0,74	-384	$1,\!8$	1920
3	5,0	0,39	-108	1,3	1120
4	4,6	0,39	-173	0,7	390
5	6,7	$0,\!46$	-577	0,7	820
6	13,2	1,07	-569	2,0	1300
7	7,6	$0,\!65$	-136	2,2	1850
8	9,4	0,70	-72	2,2	810
9	10,5	0,77	-382	1,9	2090

Fonte: Gryning e Lyck, 2002

onde u representa a velocidade média do vento (m/s), u_* representa a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s), h_s é a altura da fonte (m) e h é a altura (m) da CLP.

Exp.	Distância (m)	c $(10^{-4} sm^{-2})$
1	1900	6.48
1	3700	2.31
	2100	5.38
2	4200	2.95
	1900	8.20
3	3700	6.22
	5400	4.30
4	4000	11.66
	2100	6.72
5	4200	5.84
	6100	4.97
	2000	3.96
6	4200	2.22
	5900	1.83
	2000	6.70
7	4100	3.25
	5300	2.23
	1900	4.16
8	3600	2.02
	5300	1.52
	2100	4.58
9	4200	3.11
	6000	2.59

Tabela 8.2: Concentrações observadas para o experimentos de Copenhagen em diferentes distâncias da fonte, normalizadas pela taxa de emissão (c/Q).

Todavia, para a solução da equação de advecção-difusão conformável bidimensional transiente foram tomadas medidas de concentrações e dados micrometeorológicos com maior resolução temporal do que o habitual (TIRABASSI; RIZZA, 1997). As concentrações foram obtidas com médias de 20 minutos na segunda hora (1 h após a liberação do gás na atmosfera), enquanto os dados micrometeorológicos foram obtidos com médias de 10 minutos. As Tabelas 8.3, 8.5 e 8.4 apresentam, para oito experimentos diferentes, a altura da camada limite planetária (h) (com um único valor para cada execução), o comprimento de Monin-Obukhov (L) e a velocidade de atrito (u_*), respectivamente, utilizados nas simulações. Para calcular a velocidade convectiva (w_*), foi utilizada a relação $w_*/u_* = (-h/kL)^{1/3}$ (onde $k \sim 0, 4$, é a constante de von Karman).

Tabela 8.3: Altura da camada limite planetária h(m) nos experimentos de Copenhagen.

Experimentos de Copenhagen	1	2	3	4	5	7	8	9		
<i>h</i> (m)	1980	1920	1120	1120	390	1850	810	2090		
Fonte: Gryning e Lyck, 2002										

Fonte: Gryning e Lyck, 2002

		Ε	xperim	ientos (de Cop	enhage	en	
Passo de tempo	1	2	3	4	5	7	8	9
1	0.36	0.68	0.46	0.56	0.58	0.48	0.65	0.72
2	0.37	0.67	0.45	0.51	0.52	0.48	0.79	0.73
3	0.40	0.81	0.47	0.37	0.51	0.57	0.67	0.60
4	0.43	0.68	0.39	0.44	0.58	0.62	0.67	0.59
5	0.35	0.75	0.39	0.48	0.59	0.53	0.68	0.65
6	0.34	0.74	0.40	0.48	0.52	0.65	0.65	0.71
7	0.42	0.76	0.40	0.39	0.52	0.63	0.68	0.73
8	0.43	0.82	0.41	0.40	0.45	0.65	0.67	0.73
9	0.40	0.76	0.31	0.39	0.44	0.66	0.73	0.73
10	0.37	0.73	0.34	0.39	0.44	0.62	0.73	0.66
11	0.35	0.69	0.39	0.39	0.44	0.52	0.75	0.67
12	0.36	0.66	0.40	0.39	0.43	0.62	0.69	0.74

Tabela 8.5: Velocidade de fricção u_* (m/s) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 min.

Fonte: Gryning e Lyck, 2002

Tabela 8.4: Comprimento de Monin-Obukhov L (m) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 min.

		I	Experin	nentos	de Cop	enhage	en	
Passo de tempo	1	2	3	4	5	7	8	9
1	-26	-178	-152	-75	-492	-71	-71	-793
2	-23	-227	-194	-42	-215	-80	-85	-471
3	-83	-311	-106	-23	-368	-64	-47	-202
4	-42	-160	-101	-32	-735	-111	-49	-366
5	-36	-203	-129	-71	-366	-177	-45	-633
6	-42	-286	-70	-80	-273	-67	-63	-1358
7	-47	-155	-83	-83	-273	-87	-41	-593
8	-38	-228	-60	-101	-262	-71	-47	-471
9	-83	-184	-106	-129	-395	-56	-70	-389
11	-32	-133	-101	-129	-395	-215	-52	-262
10	-21	-389	-42	-129	-395	-111	-64	-375
12	-29	-375	-70	-129	-759	-123	-39	-252

Fonte: Gryning e Lyck, 2002

8.2 Experimento de Prairie Grass

O Experimento de Prairie Grass foi realizado em O'Neill, Nebraska, sob condições atmosféricas estáveis e instáveis, durante o verão de 1956 (BARAD, 1958). É constituído por um conjunto padrão de observações (68 experimentos) amplamente utilizado na validação de modelos de dispersão. Durante o ensaio experimental, o dióxido de enxofre (SO_2) foi liberado de uma fonte pontual contínua a uma altura de 0,46 m (exceto os experimentos de 65 a 68) do solo. As medições de concentração foram realizadas a uma altura de 1,5 m ao longo de arcos concêntricos situados em intervalos de 50, 100, 200, 400 e 800 m. Por se tratar de um terreno praticamente plano, o comprimento da rugosidade superficial é de 0,6 cm.

Os dados estão disponíveis para aproximadamente 68 experimentos de difusão realizados em uma ampla variedade de condições climáticas. Cerca de metade desses experimentos refere-se à estratificação térmica instável (diurna), enquanto o restante foi obtido em condições estáveis (noturnas), na presença de inversões de temperatura. Os perfis de temperatura obtidos através de radiossondagem e sondagens de aeronaves foram utilizados para calcular h, enquanto o u_* e L foram determinados a partir dos perfis de velocidade e temperatura do vento medidos entre 0,25 e 16 m (NIEUWSTADT, 1978). Os valores apresentados na Tabela 8.6 exibem os dados meteorológicos e as taxas de emissão do traçador que serão aplicados ao modelo, nos casos em que a condição -h/L > 10 é satisfeita.

Tabela 8.6:	Parâmetros	$meteorol \acute{o} gicos$	e taxas de	e emissão d	lo traçador	do experimer	nto de Prairie-
Grass (Cas	os instáveis)						

Experimento	L(m)	h(m)	$w_*(m/s)$	$u_*(m/s)$	Q(g/s)
1	-9	260	0,84	3,2	82
5	-28	780	$1,\!64$	7,0	78
7	-10	1340	$2,\!27$	5,1	90
8	-18	1380	$1,\!87$	$5,\!4$	91
9	-31	550	1,70	8,4	92
10	-11	950	2,01	$5,\!4$	92
15	-8	80	0,70	$3,\!8$	96
16	-5	1060	2,03	$3,\!6$	93
19	-28	650	$1,\!58$	7,2	102
20	-62	710	$1,\!92$	$11,\!3$	102
25	-6	650	$1,\!35$	3,2	104
26	-32	900	1,86	$7,\!8$	98
27	-30	1280	$2,\!08$	$7,\!6$	99
30	-39	1560	$2,\!23$	8,5	98
43	-16	600	$1,\!66$	6,1	99
44	-25	1450	$2,\!20$	7,2	101
49	-28	550	1,73	8,0	102
50	-26	750	$1,\!91$	8,0	103
51	-40	1880	$2,\!30$	8,0	102
61	-38	450	$1,\!65$	9,3	102

Fonte: Barad, 1958

8.3 Indices estatísticos

Com o objetivo de verificar a confiabilidade das parametrizações e dos resultados obtidos por meio dos modelos propostos neste trabalho, foi aplicado um conjunto de indicadores estatísticos desenvolvidos por Hanna (1989). Esses indicadores são amplamente utilizados na comunidade científica em estudos relacionados à dispersão de poluentes atmosféricos e são recomendados pela Agência de Proteção Ambiental (USEPA), pela Força Aérea dos Estados Unidos (US Air Force) e pelo Instituto Americano de Petróleo (API). A seguir, são descritos os indicadores estatísticos utilizados neste estudo e seus respectivos valores de referência. Nas expressões a seguir, as variáveis com subscrito o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas e previstas, c representa a concentração do poluente integrada lateralmente, a barra superior (\bar{c}) representa a média do conjunto de

dados e σ o desvio padrão.

8.3.1 Erro quadrático médio normalizado (NMSE)

Esse parâmetro indica os desvios que existem entre as concentrações preditas pelo modelo e aquelas obtidas através do experimento. A normatização desse índice faz com que o erro independa da grandeza dos dados, tornando-a estatisticamente adimensional. Quanto mais próximo de zero for o valor desse parâmetro, maior será a confiabilidade do modelo. Esse parâmetro é calculado por:

$$NMSE = \frac{(c_o - c_p)^2}{\overline{c_o} \, \overline{c_p}} \tag{8.1}$$

8.3.2 Fator de dois (FAT2)

Esse parâmetro indica a fração de dados (%) que estão compreendidos entre 0,5 e 2. Um modelo ideal teria um valor ótimo igual a um. Seu cálculo é realizado por meio da razão:

$$0,5 \le \frac{c_p}{c_o} \le 2 \tag{8.2}$$

8.3.3 Coeficiente de correlação (COR)

Esse índice indica o grau de similitude entre os comportamentos das concentrações observadas e preditas. O valor 1 garante um bom desempenho do modelo. É obtido através da relação:

$$COR = \frac{\overline{(c_o - \overline{c_o}) (c_p - \overline{c_p})}}{\sigma_o \sigma_p}$$
(8.3)

8.3.4 Fração de inclinação (FB)

Esse índice aponta se o modelo tende a superestimar ou subestimar as concentrações observadas. Quanto mais próximo do valor de referência 0, melhor será o desempenho do modelo. Nesse contexto, se FB > 0, o modelo subestima as concentrações e se FB < 0, o modelo superestima as concentrações. O índice é obtido pela seguinte relação:

$$FB = \frac{\bar{c}_o - \bar{c}_p}{0, 5\left(\bar{c}_o + \bar{c}_p\right)} \tag{8.4}$$

8.3.5 Desvio fracional padrão (FS)

É um indicador estatístico que avalia a variabilidade relativa entre as concentrações preditas pelo modelo e aquelas obtidas experimentalmente. Esse índice demonstra o quão bem o modelo é capaz de capturar a variabilidade das concentrações observadas e, portanto, quanto menor o desvio fracional padrão, melhor será o desempenho do modelo. É obtido através da relação:

$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0, 5 \left(\sigma_o + \sigma_p\right)} \tag{8.5}$$

8.4 Parametrização da Turbulência Atmosférica

Na modelagem da dispersão de poluentes, os coeficientes de difusão presentes na equação de advecção-difusão representam a influência da turbulência na CLP. Esses coeficientes são fundamentais para o sucesso do modelo, pois são uma aproximação física da natureza do fenômeno turbulento e permitem relacionar os modelos matemáticos com a realidade física. Portanto, a escolha adequada dos parâmetros turbulentos e sua relação com a estrutura da camada limite planetária são cruciais para garantir a confiabilidade do modelo. Para os modelos propostos neste trabalho, utilizaram-se os coeficientes de difusão vertical conforme sugerido por Degrazia, Velho & Carvalho (1997) e Troen & Mahrt (1986). O coeficiente de difusão proposto por Degrazia, Velho & Carvalho (1997) foi derivado a partir da teoria da difusão estatística de Taylor e do espectro de energia turbulenta. Esta abordagem é aplicável em toda a CLP e é adequada para longos períodos de difusão, sendo expressa por:

$$K_z(z) = 0,22(\omega_*h) \left[\frac{z}{h}\left(1-\frac{z}{h}\right)\right]^{1/3} \left[1-\exp\left(-\frac{4z}{h}\right)-0,0003\exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right]$$
(8.6)

onde h representa a altura da camada convectiva, ω_* é a velocidade convectiva e z representa a altura acima do solo.

Por outro lado, o modelo descrito no artigo de Troen & Mahrt (1986) propõe uma expressão em que as difusividades turbulentas apresentam um perfil prescrito em função de z/h, com parâmetros de escala derivados de argumentos de similaridade. Ele é aplicável em toda a CLP instável e é calculado pela expressão:

$$K_z(z) = k\omega_* z\left(1 - \frac{z}{h}\right),\tag{8.7}$$

onde $k \cong 0, 4$ representa a constante de Von Kármán.

8.5 Perfil do vento

No âmbito deste estudo, foram adotados dois modelos para descrever o comportamento dos ventos na solução obtida. O primeiro modelo utiliza um perfil logarítmico para a velocidade média do vento, o qual é baseado na Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov (MONIN; OBUKHOV, 1954). De acordo com essa teoria, quando as variáveis meteorológicas são normalizadas usando as combinações adequadas de u_* e L, elas se tornam funções universais de z/L, onde z é a altura acima do solo e L é o comprimento de Obukhov. Assim, obtém-se a partir da similaridade a seguinte relação para o perfil médio da componente horizontal do vento (MOREIRA; TIRABASSI; MORAES, 2008):

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{u_*}{kz} \Lambda_m \left(\frac{z}{L}\right),\tag{8.8}$$

onde Λ_m representa a função adimensional do gradiente da velocidade do vento. Integrandose a Eq.(8.8) entre $z \in z_0$ obtém-se a relação para o perfil vertical da componente horizontal do vento:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right] \text{ se } z \le z_b,$$
(8.9)

onde z_0 é o comprimento de rugosidade, $z_b = \min[|L|, 0.1h] \in \Psi_m$ é a função de estabilidade dada por:

$$\Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = -4, 7\left(\frac{z}{L}\right) \text{ para } \frac{1}{L} \ge 0$$
(8.10)

$$\Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = \ln\left(\frac{1+x^2}{2}\right) + \ln\left(\frac{1+x^2}{2}\right)^2 - 2\arctan x + \frac{\pi}{2} \text{ para } \frac{1}{L} < 0 \tag{8.11}$$

onde $x = \left(1 - 15\frac{z}{L}\right)^{1/4}$.

É importante destacar que, em uma atmosfera adiabática ($\Psi_m = 0$), se torna logarítmico. Nos demais casos, este será corrigido pela função de estabilidade atmosférica, em função dos valores de L.

O segundo perfil de vento adotado é caracterizado por uma lei de potência que relaciona a velocidade do vento à altura acima do solo (PANOFSKY, 1984). Esse perfil é calculado por:

$$\frac{u_2}{u_1} = \left(\frac{z_2}{z_1}\right)^n \tag{8.12}$$

na qual $u_1 e u_2$ são as velocidades médias horizontais do vento nos pontos $z_1 e z_2$ medidos na direção da vertical z a partir do solo, e n representa um número associado à intensidade da turbulência, rugosidade e diferença entre os pontos tomados como referência.

Capítulo Nove

Resultados

Os resultados numéricos foram obtidos por meio de computação algébrica utilizando a linguagem FORTRAN 90. Todas as simulações foram executadas em um notebook equipado com processador CORE i5 e 8GB de memória RAM. As rotinas computacionais foram adaptadas das pesquisas conduzidas por Buske (2008) e Moreira *et al.* (2006). Com o objetivo de tornar a compreensão e o entendimento mais acessíveis ao leitor, as Tabela 9.1 e 9.2 apresenta um resumo abrangente de todos os modelos desenvolvidos neste estudo e suas principais características.

Tabela 9.1: Quadro resumo dos modelos desenvolvidos neste trabalho.

Modelos	Equação de advecção-difusão fracionária					
Modelo 1 (secão 7 4)	Equação de advecção-difusão bidimensional					
	estacionária conformável					
Modele 2.1 (secão 7.4.1)	Equação de advecção-difusão bidimensional transiente					
	conformável com derivadas conformáveis nos termos transiente e advectivo					
Modele 2.2 (secão 7.4.2)	Equação de advecção-difusão bidimensional transiente conformável					
Wodelo 2.2 (seção 7.4.2)	com derivadas conformáveis em todos os termos derivativos					

Tabela 9.2: Quadro resumo das parametrizações, métodos de inversão e fontes adotadas por cada modelo

	Coeficiente de difusão	Perfil de vento	Método numérico de inversão	Fonte de emissão
Modelo 1	Degrazia	Logaritmo	Não se aplica	Contínua
Modelo 2.1	Degrazia	Potência	Quadratura Gaussiana	Contínua
Modelo 2.2(a)	Degrazia	Logaritmo e Potência	Fixed Talbot	Contínua e de curta duração
Modelo 2.2(b)	Troen Mahrt	Logaritmo e Potência	Fixed Talbot	Contínua

9.1 Simulações utilizando o modelo 1

Os resultados gerados pelo modelo foram comparados com os dados experimentais de Copenhagen (GRYNING; LYCK, 1984) e Prairie Grass (BARAD, 1958). Para o experimento de Prairie Grass, foram utilizados apenas os dados micrometeorológicos correspondentes ao caso fortemente convectivo (-h/L > 10) apresentado no trabalho de Nieuwstadt (1980).

Para o coeficiente de difusão vertical em ambos os experimentos, adotou-se a formulação proposta por Degrazia, Velho & Carvalho (1997), aplicada em toda a CLP e válida para longos tempos de difusão, como indicado na Eq. (8.6).

O perfil de vento logarítmico dado pela Eq. (8.9) foi adotado para simular o comportamento longitudinal do vento em ambos os experimentos (PANOFSKY, 1984). Além disso, por simplicidade, foi adotado o valor de 1 m para a correção da dimensionalidade $(\phi = \varphi = 1m)$ (MOREIRA; SANTOS, 2019).

9.1.1 Resultados do experimento de Copenhagen

Na Tabela 9.3, os índices estatísticos gerados pelos modelos α -GILTT, ADMM e GILTT são comparados, sendo referidos, respectivamente, como Modelos 1, 2 e 3. Os Modelos 2 e 3 utilizaram um coeficiente de difusão dependente das variáveis x e z, ou seja, K(x, z). Os casos I, II, III e IV do Modelo 1 correspondem aos indicadores estatísticos obtidos a partir da variação dos parâmetros fracionários α (direção longitudinal) e β (direção vertical). O caso I corresponde ao modelo de ordem inteira ($\alpha = \beta = 1$). O Modelo 2 utiliza a metodologia ADMM, que emprega a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica, considerando a CLP como um sistema multicamadas (MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA; FERREIRA NETO; CARVALHO, 2005). Por outro lado, o Modelo 3 utiliza o método GILTT para obter uma solução analítica da equação de advecção-difusão (MOREIRA *et al.*, 2005). Tanto o Modelo 2 quanto o Modelo 3 são baseados na solução da equação de advecção-difusão de ordem inteira.

Tabela 9.3: Valores de parâmetros obtidos na avaliação estatística dos modelos considerados usando o conjunto de dados Copenhagen.

Mod	Modelos α		β	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
	Caso I	1.00	1.00	0.08	0.91	1.00	0.11	0.29
Modelo 1	Caso II	0.97	0.99	0.06	0.91	1.00	0.05	0.26
	Caso III	0.94	0.98	0.06	0.90	1.00	0.00	0.24
	Caso IV	0.93	0.98	0.06	0.89	0.96	-0.03	0.23
Modelo 2	ADMM (Moreir	a et al., 2005b)	0.06	0.89	1.00	0.03	0.10
Modelo 3	GILTT (I	Moreira	a et al., 2005b)	0.02	0.97	1.00	0.01	0.05

Fonte: Autoria própria

Os casos I, II, III e IV do Modelo 1 revelam a influência dos parâmetros fracionários α e β na performance do modelo. Neste ponto, o caso III apresenta os índices estatísticos um pouco melhores quando comparados com o caso I (ordem inteira). Observa-se no caso 4 uma tendência de diminuir o FAT2 com a diminuição do valor de α e uma superestimação dos dados simulados (FB negativo).

Apesar dos parâmetros NMSE, COR e FAT2 serem muito próximos para os casos I, II e III, observa-se que os índices FB e FS são um pouco menores para o caso III. O modelo de ordem inteira apresenta um maior NMSE, FB e FS, indicando que houve uma sutil

melhora na descrição do processo de dispersão com a utilização do parâmetro fracionário não-inteiro. Além disto, comparando-se com outros modelos da literatura, o Modelo 2 apresentou resultados similares ao caso III do Modelo 1. Observa-se também que o Modelo 3, também com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte, apresenta índices estatísticos relativamente melhores que o caso III, o que inicialmente sugere que pode haver uma vantagem ao utilizar um K(x, z) na descrição do processo de difusão anômala em relação ao modelo proposto com K(z) e ajustes nos parâmetros fracionários. Salienta-se que este experimento é de estabilidade atmosférica moderadamente instável, sendo esperados valores muito próximos da unidade para os parâmetros fracionários, ou seja, baixa fracionalidade. No entanto, de forma geral, nota-se que os Modelos 1, 2 e 3 simulam de forma satisfatória as concentrações observadas.

A Figura 9.1 apresenta o gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p) , normalizadas pela taxa de emissão Q, para o experimento de Copenhagen nos casos I (ordem inteira) e III (não-inteira) utilizando o Modelo 1. A linha correspondente à bissetriz (linha contínua) indica uma perfeita concordância entre os resultados estimados e observados. Portanto, quanto mais próximos os pontos estiverem dessa reta, melhores os resultados gerados pelo modelo proposto.



Figura 9.1: Gráfico de dispersão observado (c_o) e preditas (c_p) da concentração integrada lateralmente ao nível do solo usando o perfil de vento de similaridade e o Experimento de Copenhagen (normalizado com a taxa de emissão (c/Q)). Os dados entre linhas pontilhadas correspondem à razão $c_p/c_o \in [0, 5; 2]$.

Observa-se que todos os pontos dos casos I e III estão dentro do intervalo do FAT2, revelando uma boa concordância das simulações com os dados observados, considerandose dispersão de poluentes na CLP em uma atmosfera moderadamente instável.

9.1.2 Resultados do experimento de Prairie Grass

O modelo também foi submetido às condições atmosféricas fortemente convectivas, tomando para isso os dados micrometeorológicos do experimento de Prairie Grass. Apesar dos intensos fluxos verticais e da forte turbulência na CLP, a advecção horizontal, caracterizada pelos ventos médios, pode ter um efeito tão grande quanto a turbulência neste tipo de condição atmosférica. Assim, uma medida da importância relativa da turbulência em comparação com o vento médio é a distância adimensional (WILLIS; DEARDORFF, 1976), dada por:

$$X^* = xw_*/uh \tag{9.1}$$

Esse parâmetro pode ser interpretado como a razão entre a distância horizontal medida e a distância teórica percorrida durante uma circulação convectiva (corrente ascendente e descendente). Para a difusão vertical proveniente de uma fonte na superfície, quando -h/L > 10, $\sigma_z \propto t^{3/2}$ ajusta-se bem às observações de laboratório quando $X^* < 0,5$ (WILLIS; DEARDORFF, 1976). Além desse ponto, a concentração máxima é liberada pela superfície, pois a maior parte do material alimenta as correntes térmicas e se eleva para a parte superior da CLP; nessa fase, apenas a escala convectiva pode fornecer uma descrição satisfatória da difusão.

A Tabela 9.4 mostra os índices estatísticos obtidos pelos métodos α -GILTT, MDL e ADMM, chamados de Modelos 1, 2 e 3, respectivamente. Os casos I e II do Modelo 1 correspondem aos indicadores estatísticos obtidos a partir da variação dos parâmetros fracionários α (direção longitudinal) e β (direção vertical), considerando-se os intervalos da distância convectiva adimensional X^* , descritos em Nieuwstadt (1980). O Modelo 2 é resultado da combinação dos métodos da decomposição por Laplace (MDL) e perturbação por homotopia em uma equação de ordem inteira, parametrizado com um coeficiente de difusão dependente somente da distância longitudinal da fonte, K(x), para as condições fortemente instáveis de Prairie Grass (ACIOLI; XAVIER; MOREIRA, 2019). O Modelo 3 utiliza o método ADMM descrito anteriormente, levando em consideração os resultados obtidos por uma solução integral com coeficiente de difusão em função das variáveis espaciais x e z para condições fortemente convectivas do mesmo experimento.

Tabela 9.4: Valores dos parâmetros obtidos na avaliação estatística dos modelos considerados usando o conjunto de dados Praire Grass.

Modelos		$X^* \leq$	$\leq 0,03$ $0,03 < X^* < 0,25$		$X^* \ge 0,25$		NMSE	COR	FAT2	FB	FS	
WIOC	10105	α	β	α	β	α	β	TAMBE		COR FAT2 FB FS 0.81 0.63 0.43 0.5' 0.89 0.84 0.36 0.4 0.92 0.98 -0.02 0.02	15	
Mod 1	Caso I	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.90	0.81	0.63	0.43	0.57
Mod. 1	Caso II	0.35	0.98	0.99	0.94	0.99	0.76	0.56	0.89	0.84	0.36	0.41
Mod. 2			MDL (Acioli e	et al., 2019)			0.04	0.92	0.98	-0.02	0.01
Mod. 3		ADMM (Moreira et al., 2014)						0.06	0.98	0.86	0.01	-0.08

Fonte:	Autoria	própria
--------	---------	---------

Confrontando-se os índices estatísticos obtidos para $\alpha = \beta = 1$ (ordem inteira) com os

gerados pela equação de advecção-difusão de ordem fracionária (caso II), observa-se que os resultados do caso II são melhores que os do caso I. Observa-se também que o modelo tende a subestimar a concentração observada (FB > 0).

Além da análise estatística, foram produzidos alguns gráficos para ilustrar os resultados. A Figura 9.2(a) apresenta o gráfico de dispersão das concentrações observadas e previstas pelo modelo, normalizadas pela taxa de emissão Q, integradas lateralmente ao nível do solo, para os experimentos de Prairie Grass. A Figura 9.2(b) mostra os gráficos das razões dos valores previstos para os observados, C_p/C_o . O caso II mostra uma boa melhoria nos resultados, onde quase todos os pontos de dados estão entre as linhas pontilhadas representando um fator de dois (FAT2 = 0, 84). Neste sentido, observa-se que, no caso



Figura 9.2: Gráfico de dispersão das concentrações integrada lateralmente observadas ao nível do solo (c_o) e preditas (c_p) , normalizadas pela taxa de emissão (c/Q), usando o perfil de vento de similaridade e os dados experimentais de Prairie Grass. Os dados entre as linhas pontilhadas correspondem à razão $c_p/c_o \in [0, 5; 2]$.

II, existe um maior número de pontos relacionados ao FAT2. Contudo, quando são confrontados os indicadores estatísticos obtidos pelos Modelos 2 e 3, nos quais o coeficiente de difusão depende da distância da fonte, constata-se que os índices estatísticos gerados por esses modelos são melhores que os fornecidos pelo modelo de ordem fracionária. Isto sugere que modelo parametrizado com o coeficiente de difusão dependente das variáveis espaciais x e z (K(x) e K(x, z)) conseguem captar melhor o processo de difusão anômala do que o modelo proposto neste trabalho. Dessa forma, a adoção de derivadas fracionárias seguida pelo uso de derivadas conformáveis na modelagem matemática transformou o problema fracionário em ordem inteira. Isso resultou na perda do efeito de memória intrínseco das derivadas fracionárias. No entanto, uma vez que os parâmetros fracionários ($\alpha e \beta$) estão explícitos na solução do problema, esse efeito foi, de certa forma, compensado. Dessa maneira, o efeito de memória foi considerado de forma mais efetiva no coeficiente de difusão, que depende da distância da fonte, mesmo ao se utilizar derivadas de ordem inteira.

9.1.3 Análise de sensibilidade

Dessa forma, a seguir é apresentada a Figura 9.3, que traz informações sobre o comportamento do coeficiente de difusão utilizado neste trabalho (K(z)), bem como o termo oriundo das derivadas conformáveis, denominado neste contexto de coeficiente de difusão efetivo, K^{efec} .

Na Figura 9.3(a) observa-se claramente que o K^{efec} altera a intensidade do coeficiente



Figura 9.3: Comportamento do coeficiente de difusão vertical K(z) e K^{efec}

de difusão K(z). No entanto, isto ocorre com maior intensidade em alturas mais elevadas. Como esperado, quando $\beta = 1$ as curvas são idênticas. A Figura 9.3(b) mostra que para baixas alturas a diminuição dos valores de β tem menores efeitos. Importante salientar que, diferentemente de um coeficiente de difusão dependente de x e z, o qual aumenta ou diminui a difusão com a distância da fonte (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001), o parâmetro β no K^{efec} somente faz aumentar a difusão.

A Figura 9.4 mostra o perfil vertical de concentração para três distâncias a jusante (500, 2000, 5000 m) e o comportamento dos parâmetros $\alpha \in \beta$ (1,00, 0,95 e 0,90) no processo de dispersão em função das alturas das fontes de $hs = 0,01h, 0, 1h \in 0, 2h$.

Nas Figuras 9.4(a) (primeira coluna), observa-se que, quando há uma diminuição do parâmetro α , ocorre um aumento na concentração na região da altura da fonte, enquanto que uma diminuição do parâmetro β resulta em uma diminuição da concentração nessa mesma região. Essa tendência é mais evidente para as alturas 0, 1*h* e 0, 2*h*. Este comportamento faz com que os parâmetros α e β atuem de forma significativa na concentração próxima ao solo, sendo o inverso nesta região, ou seja, maior o pico na altura da fonte, menor a concentração ao nível do solo. No entanto, em uma fonte mais baixa (0.01*h*) uma diminuição no parâmetro α produz um aumento na concentração ao nível do solo, e uma diminuição no parâmetro β produz uma diminuição na concentração. Nas Figuras 9.4(b) e 9.4(c) (segunda e terceira colunas), observa-se um efeito semelhante com relação às distâncias de 2000 e 5000 m, respectivamente. No entanto, há uma maior homogeneização da concentração na direção vertical. Os parâmetros α e β controlam eficazmente o efeito difusivo-advectivo da dispersão de poluentes na atmosfera.

A Figura 9.5 mostra a concentração integrada lateralmente (CIL) ao nível do solo em



Figura 9.4: Perfil vertical de concentração para três distâncias a jusante (x = 500, 2.000 e 5.000 m) e altura da fonte adimensional $h_s/h = 0.01$; 0.1 e 0.2

função da distância da fonte para vários valores de $\alpha \in \beta$.

Na Figura 9.5(a), pode-se observar que, ao diminuir o valor de β , ocorre um deslocamento da concentração de pico para distâncias menores em relação à fonte, resultando em uma modificação do valor da concentração máxima. Além disso, a diminuição do valor de α também pode resultar no deslocamento da concentração de pico para distâncias maiores em relação à fonte, o que acarreta uma alteração no valor da concentração máxima. Essa mudança na concentração de pico é um dos principais aspectos a serem considerados em termos de poluição do ar. No entanto, na Figura 9.5(b), é possível notar uma ligeira
diminuição na concentração de pico à medida que α diminui, enquanto o nível de concentração mais distante da fonte aumenta. Esse efeito torna-se mais evidente para valores menores de α . Neste contexto, fica claro que α e β exercem influência significativa sobre a concentração integrada lateralmente ao nível do solo. Portanto, os termos α e β são parâmetros de controle para a intensidade da advecção e difusão, respectivamente.



Figura 9.5: Concentração integrada lateralmente ao nível do solo, normalizada pela taxa de emissão (c/Q), em função da distância da fonte para diferentes valores de $\alpha \in \beta$, considerando alturas da fonte de 0,01*h* e 0,1*h*

9.2 Simulações utilizando o modelo 2.1

Nesta seção, serão discutidos os resultados das simulações numéricas dos modelos descritos nos tópicos 7.4.1. Os resultados gerados pelos modelos foram comparados com os dados do experimento de Copenhagen (GRYNING; LYCK, 1984). Normalmente, esses dados incluem valores médios horários de concentrações e dados micrometeorológicos. No entanto, para as soluções propostas nessa seção, foram utilizadas medições de concentrações e dados micrometeorológicos com uma resolução temporal mais alta do que o habitual (TIRABASSI; RIZZA, 1997). As concentrações foram registradas com médias de 20 minutos a partir da segunda hora (1 hora após a liberação do gás na atmosfera), enquanto os dados micrometeorológicos foram obtidos com médias de 10 minutos, conforme as Tabelas 8.4 e 8.5.

As simulações foram conduzidas incorporando-se ao modelo o coeficiente de difusão vertical conforme proposto no trabalho de Degrazia, Velho & Carvalho (1997), descrito pela Eq. (8.6). Adicionalmente, foi utilizado o perfil de vento de potência, descrito pela Eq. (8.12), para simular o comportamento do vento ao longo do tempo (PANOFSKY, 1984). A inversão numérica da transformada de Laplace foi realizada pelo esquema de quadratura gaussiana, conforme descrito na seção 7.3.1.

9.2.1 Testes dos pontos de Quadratura

Na Figura 9.6 são apresentados os gráficos da concentração integrada lateralmente em função da distância longitudinal da fonte em cinco instantes distintos (t = 500, 1000, 1500, 2000 e 7200 s) para diferentes pontos de quadratura ($M = 2, 4 \in 8$), com N = 100 (número de autovalores), considerando os dados meteorológicos do experimento 1 de Copenhagen e os parâmetros fracionários de ordem inteira ($\alpha = \beta = 1$).



Figura 9.6: Concentração integrada lateralmente, normalizadas pela taxa de emissão (c/Q), em função da distância para cinco instantes de tempos e diferentes pontos de quadratura Gaussiana.

Na análise da Figura 9.6, é possível perceber que as curvas exibem um comportamento oscilatório não físico quando são considerados os pontos de quadratura M = 4 (Fig. 9.6(b)) e M = 8 (Fig. 9.6(c)), especialmente para intervalos de tempo mais curtos. Neste contexto, tudo indica que o ponto ideal de quadratura é M = 2. A Figura 9.6 também evidencia que a solução transiente converge para a estacionária quando t > 7200 s. Contudo, esse comportamento precisa ser confirmado para valores de α e β fracionários. Neste sentido, na Figura 9.7 são apresentados os gráficos da concentração integrada lateralmente em relação à distância da fonte para diferentes valores de α e β (1.00, 0.95 e 0.90), usando M= 2. Uma vez que as maiores oscilações são observadas nos instantes t = 500 s e t = 1000s na Figura 9.6, optou-se por selecionar esses tempos para investigar o comportamento da curva de concentração diante das variações nos parâmetros fracionários.

A Figura 9.7 evidencia que a utilização de parâmetros fracionários não inteiros $\alpha \in \beta$ é capaz de manter as curvas de concentração sem oscilações não físicas. No entanto, observase que para β inteiro (comportamento advectivo na coordenada x, vide Eq. (7.52)) e α não inteiro (variação da concentração com o tempo t, vide Eq. (7.52)) ocorre uma suave tendência de aumentar a concentração com o aumento da distância ($\alpha = 0.9 \in \beta = 1$), mais acentuado para t = 500 s. Este problema pode ser sanado tendo em vista que as simulações para efeito de comparação estatística com dados observados serão sempre considerando baixa fracionalidade ($\alpha \in \beta > 0.95$). Neste contexto, todas as simulações



Figura 9.7: Concentrações integradas lateralmente em função da distância, normalizadas pela taxa de emissão (c/Q), para diferentes parâmetros fracionários, em dois instantes de tempo, com o mesmo número de pontos de quadratura M = 2

numéricas discutidas neste trabalho utilizam um valor fixo de M = 2.

9.2.2 Análise de sensibilidade: perfil longitudinal e vertical da concentração

A Figura 9.8 apresenta os perfis verticais de concentração para as distâncias da fonte de 500, 1000 e 4000 m, para três diferentes alturas de fonte $(h_s = 0.01h, 0.1h e 0.2h)$, analisando-se a influência dos parâmetros fracionários $\alpha \in \beta$ (1.00, 0.95 e 0.90), em t = 3600 s.

A Figura 9.8(a) mostra que, para x = 500 m, a redução dos parâmetros $\alpha e \beta$ resulta em um aumento da concentração na região próxima à altura da fonte. Para regiões próximas ao solo, a redução do parâmetro α provoca um aumento da concentração independente da altura da fonte, enquanto a diminuição do parâmetro β gera uma redução da concentração quando a fonte é posicionada nas alturas correspondentes a 0,1*h* e 0,2*h*. Isso indica que os parâmetros $\alpha e \beta$ atuam de forma significativa na concentração próxima ao solo e na região da altura da fonte. Comportamento similar é apresentado para a distância x = 1000 m, principalmente para 0,2*h*. Para alturas menores, na mesma distância, já se observa uma tendência de aumento de concentração ao nível do solo. Para a distância de 4000 m, já é observada uma tendência de aumento e homogeneização vertical da concentração. Neste contexto, observa-se que os parâmetros $\alpha e \beta$ controlam o efeito advectivo-difusivo da dispersão de poluentes na atmosfera. Normalmente, este tipo de controle é feito somente com as parametrizações do vento e do coeficiente de difusão.

A Figura 9.9 mostra a concentração integrada lateralmente ao nível do solo em função da distância da fonte para alguns valores de $\alpha \in \beta$, em t = 3600 s.



Figura 9.8: Perfil vertical de concentração para três distâncias a jusante (x = 500, 1000 e 4000 m) e altura da fonte adimensional $h_s/h = 0.01$; 0.1 e 0.2 para t = 3600 s.

A Figura 9.9(a) indica que, ao diminuir o valor de β (termo advectivo), o pico de concentração máxima pode ser deslocado para uma maior distância da fonte, sendo mais evidente para a altura de fonte 0,1*h*. Além disso, quando o valor de α (termo temporal) é reduzido, a concentração máxima mantém-se na distância da fonte, mas o valor de concentração de pico muda. A Figura 9.9(b) mostra um aumento significativo na concentração máxima quando α diminui, e um leve acréscimo da concentração de pico quando β diminui. Assim, confirma-se claramente que os parâmetros α e β controlam a intensidade da difusão e advecção no processo de dispersão de poluentes, alterando localização e a intensidade do pico de concentração. Estas considerações são muito relevantes no contexto da poluição do ar.



Figura 9.9: Concentração integrada lateralmente ao nível do solo em função da distância da fonte, normalizadas pela taxa de emissão (c/Q), para diferentes valores $\alpha \in \beta$ considerando a altura da fonte de 0,01h e 0,1h, para t = 3600 s.

9.2.3 Resultados do experimento de Copenhagen

A Tabela 9.5 apresenta os resultados estatísticos das concentrações calculadas a partir da média aritmética dos valores de concentração gerados a cada 10 minutos durante a segunda hora para diferentes valores dos parâmetros fracionários $\alpha \in \beta$.

Casos	α	β	NMSE	FAT2	COR	\mathbf{FB}	\mathbf{FS}
Ι	1.00	1.00	0.05	1.00	0.89	-0.05	0.17
II	1.00	0.99	0.06	1.00	0.89	-0.09	0.16
III	1.00	0.98	0.06	1.00	0.89	-0.13	0.14
IV	1.00	0.97	0.07	0.95	0.89	-0.17	0.13
V	0.99	1.00	0.06	1.00	0.89	-0.13	0.10
VI	0.98	1.00	0.09	1.00	0.89	-0.20	0.02
VII	0.97	1.00	0.12	0.85	0.89	-0.28	-0.06
VIII	0.99	0.99	0.07	1.00	0.89	-0.17	0.08
IX	0.99	0.98	0.09	0.90	0.89	-0.21	0.06
Х	0.98	0.99	0.10	0.90	0.89	-0.24	0.00

Tabela 9.5: Avaliação estatística do modelo usando o conjunto de dados Copenhagen.

Fonte: Autoria própria

Apesar dos índices NMSE, COR e FAT2 apresentarem valores semelhantes para a maioria dos casos considerados, pode-se observar que para os casos IV, VII e IX, a diminuição dos valores de α e β (aumento da fracionalidade) iniciou um processo de piora nos resultados com a diminuição do FAT2. Para todos os casos simulados ocorreu uma superestimação dos dados simulados (FB negativo). É importante lembrar que o experimento de Copenhagen possui estabilidade atmosférica moderada, o que explica os valores próximos de

1 para os parâmetros fracionários (fracionalidade baixa). No entanto, de forma geral, nota-se que o modelo simula muito bem as concentrações observadas, levando-se em consideração a possibilidade de acionar ou não os parâmetros fracionários na solução.

A Figura 9.12 mostra a dispersão das concentrações observadas (c_o) e preditas (c_p) pelo modelo para o experimento de Copenhagen para os casos I (ordem inteira) e VIII (nãointeira). A linha correspondente à bissetriz (linha contínua) indica uma perfeita concordância entre os resultados estimados e observados. Dessa forma, quanto mais próximos os pontos estiverem dessa linha, melhor será a qualidade dos resultados gerados pelo modelo proposto.



Figura 9.10: Gráfico de dispersão das concentrações integrada lateralmente observadas ao nível do solo (C_o) e Preditas (C_p) , usando o perfil de vento de similaridade e o Experimento de Copenhagen (normalizado com taxa de emissão (c/Q)). Os dados entre linhas pontilhadas correspondem à razão $C_p/C_o \in [0, 5; 2]$.

Verifica-se que todos os pontos referentes aos casos I e VIII estão contidos dentro do intervalo do FAT2 (entre as linhas pontilhadas), indicando uma boa correspondência das simulações com os dados observados. Isso sugere que o modelo proposto é capaz de representar de maneira satisfatória a dispersão de poluentes na CLP em uma atmosfera moderadamente instável.

A metodologia proposta neste trabalho é computacionalmente robusta, destacando-se pela introdução de parâmetros fracionários na solução, o que a torna mais avançada em modelagem matemática e computacional. No entanto, para simplificação, apenas o método de quadratura Gaussiana foi utilizado na inversão da transformada de Laplace para esse modelo nesta seção. Em contraste com métodos numéricos tradicionais, onde

todas as derivadas são aproximadas por esquemas numéricos, como diferenças finitas, no método semi-analítico proposto, esse procedimento não é necessário. Isso explica a redução no esforço computacional, já que demanda menos operações matemáticas.

9.2.4 Simulações utilizando o modelo 2.2

Os resultados gerados pelo modelo apresentado na seção 7.4.2 foram confrontados com os dados experimentais de Copenhagen (GRYNING; LYCK, 1984). De maneira similar ao exposto no tópico 9.2, utilizaram-se medições de concentrações e dados micrometeorológicos com resolução temporal maior que o habitual (TIRABASSI; RIZZA, 1997). As concentrações foram registradas com intervalos médios de 20 minutos, iniciando-se na segunda hora após a liberação do gás na atmosfera. Por outro lado, os dados micrometeorológicos foram coletados em intervalos médios de 10 minutos, como detalhado nas tabelas 8.4 e 8.5.

Para o coeficiente de difusão vertical, adotaram-se as formulações propostas por Degrazia, Velho & Carvalho (1997) (modelo 2.2(a)) e Troen & Mahrt (1986) (modelo 2.2(b)), descritas, respectivamente, pelas Eqs. (8.6) e (8.7). Adicionalmente, com o objetivo de avaliar o perfil de vento mais adequado ao modelo, foram considerados o perfil logarítmico descrito pela Eq. (8.9) e o perfil de potência, dado pela Eq. (8.12). Em todos os cenários, empregou-se o esquema de inversão da transformada de Laplace *fixed Talbot*, conforme detalhado na seção 7.3.2.

9.2.5 Análise da convergência numérica para o método de inversão fixed Talbot

Na Figura 9.11, são apresentados os gráficos da concentração integrada lateralmente em função M^* , onde M^* representa o número de termos do somatório do algoritmo FT. Esse estudo considera o modelo estacionário com N = 30 (número de autovalores), utiliza os dados meteorológicos do experimento 8 de Copenhagen e os parâmetros fracionários de ordem inteira ($\alpha = \beta = \gamma = 1$).

A partir da análise da figura 9.11(a), pode-se observar que, para $M^* = 50$, a convergência é alcançada a partir de $M^* = 30$. De maneira similar, na figura 9.11(b), onde é considerado $M^* = 100$, verifica-se que a convergência se dá a partir de $M^* = 50$. Por meio de experimentos numéricos voltados à avaliação da convergência, o valor ótimo para o parâmetro p foi determinado como 46 para todos os experimentos. Neste ponto, nas simulações que empregaram o algoritmo de inversão FT para inversão da transformada de Laplace, foram adotados $M^* = 50$ e p = 46 nas simulações numéricas.



Figura 9.11: Concentrações integradas lateralmente, normalizadas pela taxa de emissão (c/Q), em função M^* , onde M^* representa o número de termos do somatório do algoritmo FT.

9.2.6 Avaliação do modelo 2.2(a): conjunto de dados de Copenhagen

A seguir são apresentados os resultados da avaliação estatística das simulações do modelo em comparação com os dados experimentais 2D (concentrações integradas lateralmente) de Copenhagen, com o objetivo de verificar os efeitos dos parâmetros fracionários e das parametrizações no modelo proposto.

Na Tabela 9.6, os índices estatísticos gerados pelos modelos α -GILTT, ADMM e Puff são comparados e referidos, respectivamente, como Modelos 2.2(a), 3 e 4. Para o Modelo 2.2(a), os casos II e IV correspondem aos indicadores estatísticos obtidos com base na variação dos parâmetros fracionários: α (termo transiente), β (direção longitudinal) e γ (direção vertical). Os casos I e III correspondem ao modelo de ordem inteira ($\alpha = \beta = \gamma = 1$). Em todos os cenários associados ao modelo 2.2(a), empregou-se o coeficiente de difusão descrito pela Eq. (8.6). Os dados estatísticos obtidos para os casos I e II utilizam um perfil de vento de potência, descrito pela Eq. (8.12), enquanto os casos III e IV, foram parametrizados com um perfil logarítmico, descrito pela Eq. (8.9). O Modelo 3, adota

Tabela 9.6: A	Avaliação	estatística	do	modelo	usando	0	conjunto	de	dados	Copen	hagen.

Modelos		α	β	γ	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
Modelo 2.2(a)	Caso I	1.00	1.00	1.00	0.05	0.92	1.00	0.03	0.24
	Caso II	0.99	0.88	0.85	0.04	0.93	1.00	0.00	0.24
	Caso III	1.00	1.00	1.00	0.09	0.91	1.00	0.14	0.40
	Caso IV	0.99	0.94	0.97	0.06	0.91	1.00	0.00	0.35
Modelo 3	0.15	0.81	0.95	0.18	0.38				
Modelo 4	odelo 4 Modelo Puff (Tirabassi e Rizza, 1997)					0.74	0.90	0.10	0.45

Fonte: Autoria própria

a metodologia ADMM, empregando a técnica da transformada de Laplace com inversão

numérica via quadratura Gaussiana, e trata a CLP como um sistema multicamadas, onde em cada camada o coeficiente de difusão e o perfil de vento são constantes (MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA *et al.*, 2005; MOREIRA; FERREIRA NETO; CARVALHO, 2005). O Modelo 4 se baseia no método Puff (TIRABASSI; RIZZA, 1997). Este método utiliza uma abordagem geral para solucionar a equação K, recorrendo à expansão Gram-Charlier truncada (tipo A) do campo de concentração, juntamente com um conjunto finito de equações para os momentos correspondentes. Ambos os modelos levam em conta uma fonte de emissão contínua em uma camada limite com variação temporal, tendo uma resolução de tempo de 10 minutos.

Os casos I, II, III e IV relacionados ao Modelo 2.2(a) destacam a influência dos parâmetros fracionários (α , $\beta \in \gamma$) e das parametrizações adotadas (perfil de vento e coeficiente de difusão) sobre o desempenho do modelo. Apesar dos parâmetros NMSE, COR e FAT2 serem muito próximos para estes casos, observa-se que os índices estatísticos são relativamente melhores para o caso II. Além disso, comparado-se com outros modelos da literatura, os caso II e IV do Modelo 2.2(a), apresentaram resultados melhores que os modelos 3 e 4.

É possível observar que o método de inversão adotado não tem muita influência sobre os resultados estatísticos, como é comprovado ao serem comparados os resultados do caso I nas tabelas 9.6 e 9.5. Observa-se que os índices estatísticos gerados por meio do método de inversão FT estão comparativamente próximos aos obtidos pelo método de quadratura Gaussiana.

Como o experimento de Copenhagen apresenta estabilidade atmosférica moderada, isso justifica valores próximos de 1 para os parâmetros fracionários. No entanto, de forma geral, nota-se que o modelo simula muito bem as concentrações observadas, levando-se em consideração a possibilidade de acionar ou não os parâmetros fracionários na solução. A Figura 9.12 mostra a dispersão das concentrações observadas (c_o) e preditas (c_p) pelo modelo para o experimento de Copenhagen para os casos I (ordem inteira) e II (não-inteira). A linha correspondente à bissetriz (linha contínua) indica uma perfeita concordância entre os resultados estimados e observados. Dessa forma, quanto mais próximos os pontos estiverem dessa linha, melhor será a qualidade dos resultados gerados pelo modelo proposto.



Figura 9.12: Gráfico de dispersão das concentrações integrada lateralmente Observadas ao nível do solo (C_o) e Preditas (C_p) , usando o perfil de vento de similaridade e o Experimento de Copenhagen (normalizado com taxa de emissão (c/Q)). Os dados entre linhas pontilhadas correspondem à razão $C_p/C_o \in [0, 5; 2]$.

Verifica-se que todos os pontos referentes aos casos I e II estão contidos dentro do intervalo do FAT2 (entre as linhas pontilhadas), indicando uma boa correspondência das simulações com os dados observados. Neste sentido, o modelo proposto é capaz de representar de maneira satisfatória a dispersão de poluentes na CLP em uma atmosfera moderadamente instável.

9.2.7 Avaliação do modelo 2.2(b): conjunto de dados de Copenhagen

. Na Tabela 9.7, os índices estatísticos gerados pelos modelos α -GILTT, ADMM e Puff são comparados e denominados, respectivamente, como Modelos 2.2(b), 3 e 4, respectivamente. Para o Modelo 2.2(b), os casos I e III correspondem ao modelo de ordem inteira ($\alpha = \beta = \gamma = 1$). Os demais casos correspondem aos indicadores estatísticos derivados da variação dos parâmetros fracionários: α (termo transiente), β (direção longitudinal) e γ (direção vertical). Em todos os cenários vinculados ao modelo 2.2(b), empregou-se o coeficiente de difusão descrito pela Eq. (8.7). Os índices estatísticos dos casos I e II baseiam-se em um perfil de vento de potência, conforme descrito pela Eq. (8.12). Enquanto, os casos III e IV foram parametrizados com um perfil logarítmico, segundo a Eq. (8.9).

Modelos	α	β	γ	NMSE	COR	FAT2	FB	FS	
Madala 2 2(b)	Caso I	1.00	1.00	1.00	0.05	0.91	1.00	0.05	0.22
	Caso II	0.99	0.92	0.91	0.05	0.91	1.00	0.00	0.19
	Caso III	1.00	1.00	1.00	0.09	0.91	1.00	0.16	0.38
	Caso IV	0.99	0.95	0.99	0.05	0.91	1.00	0.00	0.30
Modelo 3 ADMM (Moreira et al., 2005b)						0.81	0.95	0.18	0.38
Modelo 4	Modelo F	uff (Ti	rabass	i e Rizza, 1997)	0.21	0.74	0.90	0.10	0.45
Fonte: Autoria própria									

Tabela 9.7: Avaliação estatística do modelo usando o conjunto de dados Copenhagen.

Os casos I, II, III e IV relacionados ao Modelo 2.2(b) revelam a influência dos parâmetros fracionários (α , $\beta \in \gamma$) e das parametrizações adotadas (perfil de vento e coeficiente de difusão) sobre o desempenho do modelo. Apesar dos parâmetros NMSE, COR e FAT2 serem muito próximos para estes casos, observa-se que os índices são relativamente melhores para o caso II. Além disto, comparado-se com outros modelos da literatura, todos os casos (inteiro e fracionários) do Modelo 2.2(b), exibiram resultados melhores que os modelos 3 e 4.

Ao cotejar os resultados do Modelo 2.2 nas tabelas 9.6 e 9.7, observa-se que o modelo apresenta índices estatísticos relativamente melhores quando parametrizado com o coeficiente de difusão proposto por Degrazia & Moraes (1992) e o perfil de potência (PANOFSKY, 1984).

9.2.7.1 Teste de sensibilidade: fonte de curta duração

O gráfico 9.13 representa a evolução das concentrações integradas lateralmente em função do tempo, considerando diferentes períodos de liberação (t_r) , a uma distância fixa longitudinal de 500 metros da fonte. Essa análise foi baseada nos dados meteorológicos do experimento 1 de Copenhagen, utilizando parâmetros fracionários de ordem inteira $(\alpha = \beta = \gamma = 1)$. Os experimentos foram realizados para diferentes períodos de liberação, representados por $t_r = 120s, 180s, 240s, 600s$ e $t_r > t$. A análise dos resultados indicam que os valores de pico de concentração aumentam à medida que a duração da liberação se torna mais longa, até atingir um valor limite, para períodos suficientemente longos. Além disso, para períodos de liberação prolongados, ou seja $t_r > t$, as concentrações tendem ao estado estacionário.

A figura 9.14 representa a evolução das concentrações integradas lateralmente em relação ao tempo, variando os parâmetros α , $\beta \in \gamma$ (com valores de 1,00, 0,95 e 0,90, respectivamente), mantendo uma distância fixa longitudinal de 500 metros da fonte e um período de emissão de 120 segundos. O gráfico 9.14(a) revela que para pontos situados próximos da fonte, a redução do parâmetro α (termo transiente) resulta em um aumento do tempo necessário para que o pico de concentração seja alcançado. Adicionalmente, evidencia-se uma discreta elevação no valor da concentração máxima com redução de α . Por outro lado, na figura 9.14(b), observa-se que a redução do parâmetro β (termo advectivo) acarreta em uma redução do tempo requerido para atingir o pico de concentração. Além disso, nota-se uma diminuição do valor máximo de concentração, especialmente para $\beta = 0,90$. Por fim, na figura 9.14(c), constata-se que a redução do parâmetro γ (termo difusivo) não altera o tempo necessário para alcançar a concentração de pico. Adicionalmente, é observado um sutil acréscimo no valor da concentração máxima.



Figura 9.13: Evolução temporal das concentrações integrada lateralmente, normalizada com a taxa de emissão (c/Q), para diferentes tempos de liberação t_r , a distância fixa de 500m da fonte, usando o perfil de vento de similaridade e o Experimento 1 de Copenhagen.



Figura 9.14: Evolução temporal das concentrações integrada lateralmente, normalizada pela taxa de emissão (c/Q), para diferentes valores de α , $\beta \in \gamma$ (1,00; 0,95; 0,90), a distância fixa de 500m da fonte, usando o perfil de vento de similaridade e o Experimento 1 de Copenhagen.

A figura 9.15 representa a evolução das concentrações integradas lateralmente em relação ao tempo, variando os parâmetros α , $\beta \in \gamma$ (com valores de 1,00, 0,95 e 0,90, respectivamente), mantendo uma distância fixa longitudinal de 4000 metros da fonte e um período de emissão de 120 segundos. O gráfico 9.15(a) revela que para pontos situados a 4000m da fonte, a redução do parâmetro α não altera o tempo de difusão do poluente, mantendo o intervalo necessário para alcançar a concentração de pico o mesmo. Entretanto, a variação de α exerce uma influência significativa sobre o valor da concentração máxima, resultando em um aumento na concentração de pico conforme α diminui.



Figura 9.15: Evolução temporal das concentrações integrada lateralmente, normalizada pela taxa de emissão (c/Q), para diferentes valores de α , $\beta \in \gamma$ (1,00; 0,95; 0,90), a distância fixa de 4000m da fonte, usando o perfil de vento de similaridade e o Experimento 1 de Copenhagen.

Por outro lado, na Figura 9.15(b), constata-se que a redução do parâmetro β não ocasiona alterações na concentração de pico. Ademais, destaca-se a persistência da concentração por um intervalo de tempo maior para valores de β inferiores a 1,0, com destaque para $\beta = 0,90$. Por fim, na Figura 9.15(c), verifica-se que a redução do parâmetro γ não exerce influência sobre a concentração de pico, mantendo inalterados tanto o período necessário para atingir a concentração máxima quanto o valor desta.

Conclusões

O presente trabalho representa um avanço na área das equações diferenciais parciais fracionárias, particularmente na compreensão da difusão anômala. Foram apresentadas soluções inovadoras para duas variantes da equação de advecção-difusão fracionária bidimensional, tanto em um contexto estacionário quanto transiente, incorporando parâmetros fracionários em todos os seus termos derivativos. Esse procedimento permitiu levar em conta o fenômeno da difusão anômala de forma mais consistente fisicamente, abrangendo tanto superdifusão quanto subdifusão. Além disso, a metodologia desenvolvida permite a aplicação de uma parametrização mais realista para o perfil de vento e um coeficiente de difusão que leva em conta a falta de homogeneidade da turbulência na direção vertical.

A técnica de resolução fundamentada na aplicação da metodologia α -GILTT foi introduzida com sucesso, possibilitando a transformação do problema inicial de ordem não-inteira em um problema de ordem inteira. Apesar da perda do caráter não local intrínseco às derivadas fracionárias com a aplicação da derivada conformável, os parâmetros fracionários foram mantidos, agregando um grau adicional de liberdade à solução final.

O procedimento de inserir derivadas conformáveis em todos os termos derivativos da equação advecção-difusão estacionária, aplicando os dados experimentais de Copenhagen, demonstraram uma discreta melhoria na descrição do processo de dispersão. Contudo, análises estatísticas comparativas evidenciaram uma vantagem nos modelos que utilizam coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte, especialmente em contextos de estabilidade atmosférica moderadamente instável. Para o experimento de Prairie Grass, caracterizado por distâncias menores da fonte e um contexto fortemente convectivo, observou-se uma contribuição mais significativa do modelo de ordem não-inteira para o processo de dispersão anômala. No entanto, comparando-se com os modelos de ordem inteira parametrizados com coeficientes de difusão em função da distância da fonte encontrados na literatura, o modelo proposto neste estudo não apresentou índices estatísticos melhores. Assim, embora os parâmetros fracionários influenciem o processo de dispersão, sua eficácia não foi tão marcante quanto a de modelos de ordem inteira, os quais oferecem uma parametrização mais consistente fisicamente quando confrontados com dados experimentais.

Os resultados obtidos para o modelo transiente, com base nos dados experimentais de Copenhagen, apontam que a utilização de parâmetros fracionários nos termos transiente e advectivo da equação de advecção-difusão, combinada com a inversão por quadratura Gaussiana, produziu resultados estatisticamente similares ao modelo de ordem inteira, especialmente em casos de baixa fracionalidade. No entanto, é relevante destacar uma tendência à superestimação das concentrações previstas por esse modelo, possivelmente associada às parametrizações empregadas, visto que os parâmetros fracionários exercem uma influência significativa sobre as concentrações simuladas, conforme evidenciado pelos testes de sensibilidade. Ademais, este estudo revelou que o emprego do método de inversão por quadratura Gaussiana ocasiona um mal condicionamento, evidenciado pela presença de oscilações não físicas no gráfico das concentrações em relação à distância da fonte. Para superar essa limitação, foi adotado o método de inversão Fixed Talbot, o qual se mostrou eficaz na resolução desse problema, proporcionando resultados mais consistentes e confiáveis. Esta categoria de soluções possibilita uma análise minuciosa dos parâmetros do modelo, expressando-os de maneira clara e direta através de equações matemáticas. Em contraste com as soluções puramente analíticas existentes, a abordagem que combina técnicas analíticas e numéricas oferece maior flexibilidade, não estando restrita a padrões específicos para os perfis de velocidade (u) e coeficiente de difusão (k). Isso sugere a capacidade de lidar com perfis que se assemelhem às condições reais, conferindo à solução uma maior robustez e aplicabilidade.

Por fim, os resultados para o modelo transiente, que incorpora parâmetros fracionários em todos os termos da equação e utiliza dados experimentais de Copenhagen, apontam para uma discreta melhoria na descrição do processo de dispersão, sobretudo quando confrontados com outros modelos da literatura. As simulações também revelam a influência da parametrização e do método de inversão selecionado para o modelo. Foi constatado que os parâmetros fracionários exerceram uma influência mais significativa nos índices estatísticos quando o modelo incorporou um coeficiente de difusão conforme definido pela Eq. (8.6) e um perfil de vento de potência. Quanto ao método de inversão, observou-se uma melhoria sutil nos índices ao empregar o método de inversão FT. Assim, os resultados sugerem que os parâmetros fracionários estão sujeitos à estabilidade atmosférica e, portanto, podem ser incorporados em conjunto com uma parametrização adequada dos parâmetros físicos, tais como perfis de vento e coeficiente de difusão, com o objetivo de aprimorar o processo de dispersão de poluentes atmosféricos.

Na análise da fonte de curta duração integrada ao modelo transiente, observa-se que em locais próximos à fonte (x = 500m), os picos de concentração aumentam à medida que o período de emissão aumenta, convergindo para um estado estacionário quando $t_r > t$. Além disso, para pontos próximos da fonte, a evolução temporal das concentrações é significativamente sensível a variação dos parâmetros fracionários α , $\beta \in \gamma$, com destaque para os parâmetros α , β . Contudo, tomando-se pontos mais distantes da fonte (x = 4000m), constata-se que tais parâmetros fracionários exercem uma influência limitada sobre o tempo de difusão do poluente, resultando para todos os cenários o mesmo intervalo de tempo para atingir a concentração de pico. Portanto, infere-se que os parâmetros fracionários exercem uma influência mais expressiva em locais próximos à fonte.

Na perspectiva de futuras pesquisas, será proposto um modelo transiente que integre derivadas conformáveis em todos os termos, incluindo um coeficiente de difusão vertical que seja dependente das variáveis espaciais $x \in z$. Adicionalmente, o método α -GILTT será aplicado empregando a derivada segundo Caputo. Esta abordagem promete ampliar a compreensão dos fenômenos estudados, permitindo uma análise mais abrangente e precisa dos processos envolvidos, especialmente no contexto de difusão anômala.

Definições, Lemas e Teoremas do Cálculo Fracionário Clássico

A.0.1 Derivada fracionária segundo Grünwald-Letnikov

A derivada fracionária de Grünwald-Letnikov, foi introduzida por Grunwald (1867) e Letnikov (1868). Essa formulação é de grande importância em problemas numéricos e se baseia na generalização da diferenciação ordinária de ordem $n \in \mathbb{N}$. Além disso, em dois notáveis trabalhos, Lorenzo e Hartley (HARTLEY; LORENZO, 1998; LORENZO, 2000) utilizam a definição de Grunwald-Letnikov para propor, numericamente, uma interpretação geométrica da derivada fracionária. Podlubny (2001) avança na discussão ao apresentar uma interpretação física da derivada segundo Grünwald-Letnikov.

A seguir, será apresentado o processo de obtenção da fórmula de Grünwald-Letnikov.

Lema A.1. A derivada n-ésima, $n \in \mathbb{N}$, de uma função f pode ser escrita como

$$\frac{\mathrm{d}^{n}}{\mathrm{d}x^{n}}f(x) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{h^{n}} \sum_{k=0}^{n} (-1)^{k} \binom{n}{k} f(x-kh)$$
(A.1)

A fim de comprovar a validade da Eq. (A.1), o método da indução foi empregado, partindo da definição da derivada de ordem inteira. Neste contexto, a equação $f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$ foi utilizada. Ao realizar a mudança de variável z = x + h, a expressão torna-se $f'(z) = \lim_{h \to 0} \frac{f(z) - f(z-h)}{h}$. Dessa forma, conclui-se que a Eq. (A.1) é válida para n = 1.

Assumindo que a Eq. (A.1) é válida para $n = m \operatorname{com} m \in \mathbb{N}$, ou seja,

$$\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} f(x) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{h^m} \sum_{k=0}^m (-1)^k \binom{m}{k} f(x-kh),$$

demonstrar-se-á que a Eq. (A.1) é válida para n = m + 1. De fato,

$$\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}f(x) = \frac{d}{dx}\frac{d^m}{dx^m}f(x)
= \lim_{h \to 0} \frac{f^{(m)}(x) - f^{(m)}(x-h)}{h}
= \lim_{h \to 0} \frac{\frac{1}{h^m}\sum_{k=0}^m (-1)^k {m \choose k} f(x-kh) - \frac{1}{h^m}\sum_{k=0}^m (-1)^k {m \choose k} f(x-h-kh)}{h}$$

reindexando o segundo somatório por $k \to k - 1$, obtém-se,

$$\frac{\mathrm{d}^{m+1}}{\mathrm{d}x^{m+1}}f(x) = \lim_{h \to 0} \frac{\sum_{k=0}^{m} (-1)^k \binom{m}{k} f(x-kh) - \sum_{k=1}^{m+1} (-1)^k \binom{m}{k-1} f(x-kh)}{h^{m+1}}$$
$$= \lim_{h \to 0} \frac{\sum_{k=0}^{m+1} (-1)^k [\binom{m}{k} + \binom{m}{k-1}] f(x-kh)}{h^{m+1}}$$

Considerando $\binom{m}{k} + \binom{m}{k-1} = \binom{m+1}{k}$, pode-se escrever,

$$\frac{\mathrm{d}^{m+1}}{\mathrm{d}x^{m+1}}f(x) = \lim_{h \to 0} \frac{\sum_{k=0}^{m+1} (-1)^k \binom{m+1}{k} f(x-kh)}{h^{m+1}}$$

Isso significa que a Eq. (A.1) é válida para n = m + 1, o que, por sua vez, implica que a Eq. (A.1) é válida para qualquer valor de $n \in \mathbb{N}$, como pretendido na demonstração. Ao generalizar o Lema 1 para qualquer ordem, obtém-se a definição da derivada fracionária de Grünwald-Letnikov (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015; TEODORO; OLIVEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2018; TEODORO; MACHADO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2019).

Definição A.1. A derivada fracionária de Grünwald-Letnikov de ordem α , sendo $\alpha \in \mathbb{R}$ de uma função f é definida através do limite de uma série, a saber,

$$\frac{\mathrm{d}^{\alpha}}{\mathrm{d}x^{\alpha}}f(x) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{h^{\alpha}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{\alpha} \binom{\alpha}{n} f(x-kh)$$
(A.2)

onde $D_{GL}^{\alpha}f(x)$ representa a derivada fracionária de Grünwald-Letnikov de ordem α da função f(x).

A.0.2 Derivada fracionária segundo Riemann-Liouville

O trabalho pioneiro que introduziu a ideia que hoje chamamos de derivada de Riemann-Liouville foi apresentado por Sonin (1869). Para compreendermos a definição da derivada fracionária de Riemann-Liouville, é necessário primeiro entender a integral fracionária, pois é com base nela que a definição foi construída.

A integral de ordem n, onde $n \in \mathbb{N}$, é obtida através do teorema que envolve a função de Gelfand-Shilov e a transformada de Laplace do produto de convolução. Para melhor compreensão, apresentaremos a seguir as definições da função de Gelfand-Shilov e a transformada de Laplace da convolução.

Definição A.2. Função de Gelfand-Shilov

A função de Gelfand-Shilov é definida como segue, para $n \in \mathbb{N}$:

$$\phi_n = \begin{cases} \frac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}, & se \ t > 0\\ 0, & se \ t \leqslant 0 \end{cases}$$

Propriedade A.1. Transformada de Laplace da convolução

Sejam f(t) e g(t) duas funções com transformadas de Laplace F(s) e G(s), respectivamente, desde que existam. A transformada de Laplace do produto de convolução f(t)*g(t), denotada por $\mathscr{L}[f(t)*g(t)]$, é igual ao produto das transformadas de Laplace das funções f(t) e g(t), ou seja:

$$\mathscr{L}[f(t) * g(t)](s) = \mathscr{L}[f](s) * \mathscr{L}[g](s) = F(s) * G(s)$$

onde o produto de convolução de Laplace é dado por

$$f(t) * g(t) = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau)d\tau dt = \int_0^t g(t-\tau)f(\tau)d\tau dt$$

Para obter a integral de ordem n, com $n \in \mathbb{N}$, será aplicado o teorema que envolve a função de Gelfand-Shilov e a transformada de Laplace do produto de convolução, conforme será demonstrado a seguir.

Teorema A.1. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $t \in \mathbb{R}_+$ e f(t) uma função integrável. A integral de ordem n é dada por:

$$J^{n}f(t) = \phi_{n}(t) * f(t) = \int_{0}^{t} \phi_{n}(t-\tau)f(\tau)d\tau = \int_{0}^{t} \frac{(t-\tau)^{n-1}}{(n-1)!}f(\tau)d\tau$$
(A.3)

onde * denota o produto de convolução de Laplace.

Demonstração: Para provar o Teorema A.1, o método da indução será aplicado no parâmetro n. Iniciando com o caso n = 1, tem-se que:

$$Jf(t) = \int_0^t f(\tau)d\tau = \int_0^t \frac{(t-\tau)^{1-1}}{(1-1)!} f(\tau)d\tau = \phi_1(t) * f(t)$$

Assumindo que o Teorema A.1 é válido para n = m, ou seja, $J^m f(t) = \phi_m(t) * f(t)$, será demonstrada a sua validade para n = m + 1. De fato, pela hipótese de indução, tem-se:

$$J^{n+1}f(t) = J[J^n f(t)] = J[\phi_n(t) * f(t))] = \int_0^t \phi_n(u) * f(u) du = \int_0^t \int_0^u \frac{(u-\tau)^{n-1}}{(n-1)!} f(\tau) d\tau du$$

Aplicando o teorema de Goursat (CAPELAS DE OLIVEIRA, 2005) é possível mudar a ordem de integração, ou seja

$$J^{n+1}f(t) = \int_0^t \left[\int_\tau^t \frac{(t-\tau)^{n-1}}{(n-1)!} du \right] f(\tau) d\tau$$

Calculando a integral entre os colchetes, obtém-se:

$$J^{n+1}f(t) = \int_0^t \frac{(t-\tau)^n}{(n)!} f(\tau) d\tau = \phi_{n+1}(t) * f(t)$$

Conforme pretendíamos demonstrar.

A partir do Teorema A.1 e da função gama, que é uma generalização do conceito de fatorial, a integral de ordem inteira pode ser generalizada para uma integral de ordem arbitrária, onde $n \in \mathbb{R}$

Definição A.3. Seja f(x) uma função integrável. Definimos a integral de ordem arbitrária $\alpha \in \mathbb{R}$ da função y(x), denotada por $J^{\alpha}f(x)$, através da seguinte expressão:

$$J^{\alpha}f(x) = \phi_{\alpha}(x) * f(x) = \int_0^x \frac{(x-\tau)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} f(\tau)d\tau$$
(A.4)

onde

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

Definição A.4. Integral de Riemann-Liouville.

Seja f(x) uma função contínua e $\mu \in \mathbb{R}_+$. Definimos o operador integral de Riemann-Liouville de ordem μ no intervalo [a, b], denotado por J^{μ}_a , atuando na função f(x), através da expressão:

$$J_a^{\mu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} \int_a^x (x - \xi)^{\mu - 1} f(\xi) d\xi$$
 (A.5)

para $a \leq x \leq b$. No particular caso $\mu = 0$, definitions $J_a^{\mu} \equiv I$, o operador identidade.

A definição de derivada de ordem arbitrária, proposta por Riemann-Liouville, é fundamentada no fato de que a derivação é a operação inversa da integração e na lei dos expoentes (MILLER; ROSS, 1993). Nesse contexto, são apresentadas as definições das derivadas de ordens arbitrárias de Riemann-Liouville em um intervalo finito do eixo real, juntamente com algumas de suas propriedades em espaços de funções contínuas e contínuas por partes.

Considerando a Definição A.4 da Integral de Riemann-Liouville, é apresentada a seguir a derivada fracionária segundo Riemann-Liouville.

Definição A.5. Derivada de Riemann-Liouville.

Sejam α um número complexo tal que $Re(\alpha) > 0$ e m o menor inteiro maior que $Re(\alpha)$, assim $m - 1 < Re(\alpha) \leq m$. A derivada fracionária segundo Riemann-Liouville de uma função qualquer f é dada por:

$$D^{\alpha}f(t) = \frac{\mathrm{d}^{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t^{m}} \left[J^{m-\alpha}f(t) \right] = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{\mathrm{d}^{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t^{m}} \int_{0}^{t} \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha-m+1}} d\tau \tag{A.6}$$

Em outras palavras, tem-se que a derivada de Riemann-Liouville de ordem não inteira é igual à derivada de ordem inteira de uma integral de ordem não inteira, onde J é definido pela Eq. (A.5).

A.0.3 Derivada fracionária segundo Caputo

Durante a década de 1960, Caputo apresentou uma revisão da definição da derivada fracionária de Riemann-Liouville. Em sua versão, a derivada de ordem arbitrária provém da integral de ordem arbitrária aplicada a uma derivada de ordem inteira. Por outro lado, na abordagem de Riemann-Liouville, essa derivada arbitrária resulta da aplicação da derivada de ordem inteira a uma integral de ordem arbitrária, ou seja, a definição proposta por Caputo, corresponde em uma inversão na ordem dos operadores (CAPUTO, 1966). Posteriormente, em 1969, Caputo utilizou essa formulação para solucionar um problema de viscoelasticidade, que consistia em descrever como um material se deforma ao longo do tempo sob a ação de uma força aplicada. O modelo levou em consideração o efeito de memória do material (CAPUTO, 1969).

Para muitos autores (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015; TEODORO; OLI-VEIRA; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2018; RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015), a formulação de Caputo é mais adequada em problemas com dependência temporal. Isso ocorre porque, diferentemente da formulação de Riemann-Liouville, a derivada de uma constante é nula e pode ser interpretada como uma taxa de variação. Além disso, a derivada de Caputo depende das condições iniciais dadas nas derivadas usuais da função, que são fisicamente interpretadas, enquanto na formulação de Riemann-Liouville, ela depende de condições na integral fracionária que não têm uma interpretação física trivial.

A seguir, será apresentada a definição da derivada fracionária segundo Caputo, bem como suas principais propriedades.

Definição A.6. Derivada fracionária segundo Caputo

Sejam α um número complexo tal que $Re(\alpha) > 0$ e m o menor inteiro maior que $Re(\alpha)$, assim $m - 1 < Re(\alpha) \leq m$. A derivada fracionária de Caputo de uma função suficientemente bem comportada f é dada por:

$${}^{C}D_{t}^{\alpha}f(t) = J^{m-\alpha}[D^{m}f(t)] = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_{0}^{t} (t-\tau)^{m-\alpha-1} \frac{d^{m}}{d\tau^{m}} f(\tau)d\tau$$
(A.7)

Como consequência da Definição A.6, nota-se que a derivada fracionária de ordem α , segundo Caputo, de uma constante é sempre nula. De fato,

$${}_{*}D^{\alpha}c = J^{m-\alpha}[D^{m}c] = J^{m-\alpha}0 = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)}\int_{0}^{t} (t-\tau)^{m-\alpha-1}0d\tau = 0$$

sendo c uma constante e $Re(\alpha) > 0$.

Observa-se que a derivada de Caputo é mais restritiva que a derivada fracionária de Riemann-Liouville, uma vez que para a existência da derivada fracionária de Caputo de

ordem α de uma função f, é necessário que a derivada de ordem m de f seja integrável, onde $m - 1 < Re(\alpha) \leq m$ (CAMARGO; CAPELAS DE OLIVEIRA, 2015).

Propriedade A.2. Operador Linear

A derivada fracionária segundo Caputo é um operador linear . Assim, temos

$$D^{\alpha}(af(t) + bg(t)) = aD^{\alpha}f(t) + bD^{\alpha}g(t)$$

onde f e g são funções quaisquer e a e b são constantes (PODLUBNY, 1999).

Teorema A.2. Transformada de Laplace da Derivada Fracionária Segundo Caputo

Sejam $Re(\alpha) > 0$ e $m \in \mathbb{N}$ tais que $m - 1 < Re(\alpha) \leq m$, então a equação para a transformada de Laplace da derivada fracionária de ordem α segundo Caputo é dada por

$$\mathcal{L}\{^{C}D^{\alpha}f(t)\} = s^{\alpha}\mathcal{L}[f(t)] - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1}f^{(k)}(0)$$

sendo $f^{(k)}(0) = \lim_{t \to 0} D^k f(t)$.

A.0.4 Critérios para reconhecimento de uma derivada fracionária

O cálculo fracionário tem crescido em popularidade e importância nas últimas três décadas, em grande parte devido às suas aplicações promissoras em diversos campos da ciência e engenharia (SCHERER *et al.*, 2011). Existem diversas formulações para a derivada fracionária (CAPELAS DE OLIVEIRA; MACHADO *et al.*, 2014) e este número tem aumentado (RODRIGUES; OLIVEIRA, 2015). Diante deste cenário, surge a seguinte questão: Quais critérios um operador deve cumprir para ser considerado uma derivada fracionária?

Para esclarecer este questionamento, Ross (2006) apresentou cinco critérios que um operador precisa cumprir para ser reconhecido como uma derivada fracionária. Estes critérios são:

- 1. A derivada fracionária de uma função analítica é analítica;
- 2. A derivação fracionária, quando a ordem é um inteiro positivo $n, n \in \mathbb{N}$, deve produzir o mesmo resultado da n-ésima derivação ordinária e quando a ordem é um inteiro negativo $-n, n \in \mathbb{N}$, deve produzir o mesmo resultado da repetição n-ésima da integração ordinária;
- 3. A derivada de ordem zero de uma função é a própria função;
- 4. A derivada fracionária é um operador linear;

5. A lei dos expoentes $D^{\alpha}D^{\beta}f(x) = D^{\alpha+\beta}f(x)$ é satisfeita para $\alpha < 0$ e $\beta < 0$.

Ortigueira e Machado reformularam o critério proposto por Ross tendo em vista a necessidade da derivada fracionária do produto de duas funções satisfazer a regra de Leibniz em sua versão fracionária (ORTIGUEIRA; MACHADO, 2015). Esse novo critério também é constituído de cinco propriedades, são elas:

- 1. A derivada fracionária é um operador linear;
- 2. A derivada de ordem zero de uma função é a própria função;
- 3. A derivação fracionária, quando a ordem é um inteiro positivo $n, n \in \mathbb{N}$, deve produzir o mesmo resultado da n-ésima derivação ordinária e quando a ordem é um inteiro negativo $-n, n \in \mathbb{N}$, deve produzir o mesmo resultado da repetição n-ésima da integração ordinária;
- 4. A lei dos expoentes $D^{\alpha}D^{\beta}f(x) = D^{\alpha+\beta}f(x)$ é satisfeita para $\alpha < 0$ e $\beta < 0$;
- 5. Vale a generalização da regra de Leibniz, a saber, $D^{\alpha}(f(x)g(x)) = \sum_{k=0}^{\infty} {\alpha \choose k} D^k f(x) D^{\alpha-k}g(x)$, sendo ${\alpha \choose k} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-k+1)k!}$.

Demonstrações dos Teoremas do Capítulo Seis

Teorema 6.1. Se uma função $f(t) : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ é α -diferenciável em $t_0 > 0, \alpha \in (0, 1]$, então f é contínua em t_0 .

Demonstração:

Como $f(t_0 + \varepsilon t_0^{1-\alpha}) - f(t_0) = \frac{f(t_0 + \varepsilon t_0^{1-\alpha}) - f(t_0)}{\varepsilon} \varepsilon$. Então:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} [f(t_0 + \varepsilon t_0^{1-\alpha}) - f(t_0)] = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(t_0 + \varepsilon t_0^{1-\alpha}) - f(t_0)}{\varepsilon} \lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon$$

Fazendo $h = \varepsilon t_0^{1-\alpha}$, obtemos

$$\lim_{\varepsilon \to 0} [f(t_0 + h) - f(t_0)] = f^{(\alpha)}(t_0).0$$

o que implica que

$$\lim_{\varepsilon \to 0} f(t_0 + h) = f(t_0)$$

Portanto, f é contínua em t_0 .

Teorema 6.2. Sejam $\alpha \in (0,1]$ e f, g são funções α -diferenciáveis em um ponto t > 0. Então:

(1) $\overline{T}_{\alpha}(af + bg) = a\overline{T}_{\alpha}(f) + b\overline{T}_{\alpha}(g)$, para todo $a, b \in \mathbb{R}$ (2) $\overline{T}_{\alpha}(t^{p}) = pt^{p-\alpha}$, para todo $p \in \mathbb{R}$ (3) $\overline{T}_{\alpha}(\lambda) = 0$, para toda função constante $f(t) = \lambda$, onde $\lambda \in \mathbb{R}$ (4) $\overline{T}_{\alpha}(f.g) = f.\overline{T}_{\alpha}(g) + g.\overline{T}_{\alpha}(f)$ (5) $\overline{T}_{\alpha}(f/g) = \frac{f.\overline{T}_{\alpha}(g) - g.\overline{T}_{\alpha}(f)}{g^{2}}$ (6) Se, além disso, f é diferenciável, então $\overline{T}_{\alpha}[f(t)] = t^{1-\alpha} \frac{df(t)}{dt}$ (7) $\overline{T}_{t}^{\alpha}(fog)(t) = [\overline{T}_{g(t)}^{\alpha}f(g(t))] [\overline{T}_{t}^{\alpha}g(t)] g(t)^{\alpha-1}$ supondo que a derivada conformável $\overline{T}_{t}^{\alpha}(fog)(t)$ exista.

Visto que os resultados de (1) a (3) são uma consequência direta da definição, apenas os

resultados (4), (5), (6) e (7) serão demonstrados, pois são os mais relevantes. **Demonstração:**

Para provar o resultado (4), será aplicada a definição 6.1 e será considerado t > 0, logo:

$$\begin{split} \overline{T}_{\alpha}(f.g) &= \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(t + \varepsilon t^{1-\alpha})g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) - f(t)g(t)}{\varepsilon} \\ &= \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(t + \varepsilon t^{1-\alpha})g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) - f(t)g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) + f(t)g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) - f(t)g(t)}{\varepsilon} \\ &= \lim_{\varepsilon \to 0} \left(\frac{f(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) - f(t)}{\varepsilon} g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) \right) + f(t)\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) - g(t)}{\varepsilon} \\ &= \overline{T}_{\alpha}(f)(t)\lim_{\varepsilon \to 0} g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) + f(t)\overline{T}_{\alpha}(g)(t). \end{split}$$

Dado que g é contínua em t, pode-se concluir que $\lim_{\varepsilon \to 0} g(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) = g(t)$, o que finaliza a demonstração do resultado (4). O mesmo argumento pode ser aplicado para demonstrar a parte (5) do teorema.

Para demonstrar a afirmação (6), a variável h será tomada como $h = \varepsilon t^{1-\alpha}$ na Definição 6.1 e, em seguida, $\varepsilon = t^{\alpha-1}h$ será considerado. Dessa forma, tem-se:

$$\overline{T}_{\alpha}(f)(t) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(t + \varepsilon t^{1-\alpha}) - f(t)}{\varepsilon}$$
$$= \lim_{h \to 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{ht^{\alpha-1}}$$
$$= t^{1-\alpha} \lim_{h \to 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{h}$$
$$= t^{1-\alpha} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}(t).$$

Por fim, para comprovar a propriedade (7), a definição 6.1 será aplicada como segue:

$$\overline{T}_{t}^{\alpha}(f(g(t))) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(g(t + \varepsilon t^{1-\alpha})) - f(g(t))}{\varepsilon}$$
(B.1)

Ao aplicar a mudança de variáveis $w = t + \varepsilon t^{1-\alpha}$, nota-se que $\varepsilon = (w - t)t^{1-\alpha}$ e, como resultado, o limite descrito na Eq. (B.1) pode ser reescrito como:

$$\begin{split} \overline{T}_{t}^{\alpha}(f(g(t))) &= \lim_{w \to t} \frac{f(g(w)) - f(g(t))}{(w - t)} t^{1 - \alpha} \\ &= \lim_{w \to t} \frac{f(g(w)) - f(g(t))}{g(w) - g(t)} \times \lim_{w \to t} \frac{g(w) - g(t)}{(w - t)} t^{1 - \alpha} \\ &= \lim_{w \to t} \frac{f(g(w)) - f(g(t))}{g(w) - g(t)} \frac{g(t)^{\alpha - 1}}{g(t)^{\alpha - 1}} \times \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(t + \varepsilon t^{1 - \alpha}) - g(t)}{\varepsilon} \end{split}$$

Considerando que as funções $f \in g$ são contínuas devido à sua α -diferenciabilidade, Δu pode ser considerado como $(g(w) - g(t))g(t)^{\alpha-1}$. Dessa forma, a expressão g(w) =

 $\Delta u g(t)^{\alpha-1} + g(t)$ pode ser derivada, o que permite concluir que:

$$\begin{split} \overline{T}_t^{\alpha}(f(g(t))) &= \lim_{w \to t} \frac{f(g(w)) - f(g(t))}{g(w) - g(t)} \frac{g(t)^{\alpha - 1}}{g(t)^{\alpha - 1}} \times \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(t + \varepsilon t^{1 - \alpha}) - g(t)}{\varepsilon} \\ &= g(t)^{\alpha - 1} \times \lim_{\Delta u \to 0} \frac{f(g(t) + \Delta ug(t)^{1 - \alpha}) - f(g(t))}{\Delta u} \times \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(t + \varepsilon t^{1 - \alpha}) - g(t)}{\varepsilon} \\ &= \left[\overline{T}_{g(t)}^{\alpha} f(g(t))\right] \left[\overline{T}_t^{\alpha} g(t)\right] g(t)^{\alpha - 1} \end{split}$$

conforme pretendia-se demonstrar.

Teorema 6.3. Sejam x = x'(t) e y = y'(t) funções diferenciáveis em t, e seja z = f(x, y) diferenciável em (x'(t), y'(t)). Então, z = f(x'(t), y'(t)) é diferenciável em t e

$$\overline{T}^{\alpha}z(t) = \frac{\partial f}{\partial x}\overline{T}^{\alpha}x'(t) + \frac{\partial f}{\partial y}\overline{T}^{\alpha}y'(t)$$
(B.2)

Demonstração: A demonstração da Eq. (B.2) pode ser obtida a partir da premissa de que a função z(t) = f(x'(t), y'(t)) é diferenciável no sentido convencional, e da validade da relação dada pela Eq. (6.3). Neste contexto, tem-se

$$\begin{split} \overline{T}_{t}^{\alpha} z(t) &= t^{1-\alpha} \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} \\ &= t^{1-\alpha} \left(\frac{\partial z}{\partial x} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial z}{\partial y} \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \right) \\ &= \left[\frac{\partial z}{\partial x} \left(t^{1-\alpha} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \right) + \frac{\partial z}{\partial y} \left(t^{1-\alpha} \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \right) \right] \\ &= \frac{\partial f}{\partial x} \overline{T}_{t}^{\alpha} x'(t) + \frac{\partial f}{\partial y} \overline{T}_{t}^{\alpha} y'(t) \end{split}$$

conforme pretendia-se demonstrar.

Teorema 6.4. Teorema de Rolle para funções diferenciáveis fracionárias conformáveis

Seja a > 0 e $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ uma função dada que satisfaz: (i) f é contínua em [a, b], (ii) f é α -diferenciável para alguma $\alpha \in (0, 1)$, (iii) f(a) = f(b). Então, existe $c \in (a, b)$, tal que $\overline{T}_{\alpha}f(c) = 0$.

Demonstração:

A condição (ii) implica que f é diferenciável em]a, b[para algum α no intervalo]0, 1[.

Isso significa que $f^{(\alpha)}(t)$, existe para todo t em]a, b[, e é dada por $f^{(\alpha)}(t) = t^{1-\alpha}f'(t)$. De acordo com o teorema clássico de Rolle, como f é contínua em [a, b] e f(a) = f(b), existe pelo menos um ponto c em]a, b[no qual f'(c) = 0. Substituindo f'(c) = 0 em $f^{(\alpha)}(t)$, obtém-se $f^{(\alpha)}(c) = c^{1-\alpha}f'(c) = 0$, conforme pretendia-se demonstrar.

Teorema 6.5. Teorema do Valor Médio para Funções Diferenciáveis Fracionais Conformáveis.

Seja a > 0 e $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ uma função dada que satisfaz: (i) f é contínua em [a, b]. (ii) f é α -diferenciável para algum $c \in (0, 1)$. Então, existe $c \in (a, b)$, tal que $f^{\alpha}(c) = \frac{f(b) - f(a)}{\frac{1}{\alpha}b^{\alpha} - \frac{1}{\alpha}a^{\alpha}}$.

Demonstração:

Considere a função auxiliar

$$g(x) = f(x) - f(a) - \frac{f(b) - f(a)}{\frac{1}{\alpha}b^{\alpha} - \frac{1}{\alpha}a^{\alpha}} \left(\frac{1}{\alpha}x^{\alpha} - \frac{1}{\alpha}a^{\alpha}\right)$$

Nesse contexto, observe que a função g atende às condições do teorema de Rolle, ou seja, g(a) = g(b) = 0 e g é contínua em [a, b], o que implica a existência de um $c \in (a, b)$ tal que $\overline{T}_{\alpha}(g(c)) = 0$. Dessa forma, ao calcular $\overline{T}_{\alpha}(g(c))$, obtém-se $\overline{T}_{\alpha}(f(x)) = \frac{f(b)-f(a)}{\frac{1}{\alpha}b^{\alpha}-\frac{1}{\alpha}a^{\alpha}}$, como pretendido na demonstração.

Teorema 6.6. Se f é diferenciável e a = 0, então a seguinte propriedade é válida:

$$I_a^{\alpha} \overline{T}_t^{\alpha} f(t) = f(t) - f(0) \tag{B.3}$$

Demonstração:

$$I^{\alpha} \left(\overline{T}_{t}^{\alpha} f(t) \right) = \int_{0}^{t} \xi^{\alpha - 1} \overline{T}_{\xi}^{\alpha} f(\xi) d\xi$$
$$= \int_{0}^{t} \xi^{\alpha - 1} \xi^{1 - \alpha} f'(\xi) d\xi$$
$$= \int_{0}^{t} f'(\xi) d\xi$$
$$= f(t) - f(0)$$

como pretendido na demonstração.

ABATE, J.; CHOUDHURY, G. L.; WHITT, W. An introduction to numerical transform inversion and its application to probability models. *Computational probability*, Springer, p. 257–323, 2000.

ABATE, J.; VALKÓ, P. P. Multi-precision laplace transform inversion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley Online Library, v. 60, n. 5, p. 979–993, 2004.

ABDELHAKIM, A. A. The flaw in the conformable calculus: it is conformable because it is not fractional. *Fractional Calculus and Applied Analysis*, De Gruyter, v. 22, n. 2, p. 242–254, 2019.

ABDELHAKIM, A. A.; MACHADO, J. A. T. A critical analysis of the conformable derivative. *Nonlinear Dynamics*, Springer, v. 95, p. 3063–3073, 2019.

ABDELJAWAD, T. On conformable fractional calculus. *Journal of computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 279, p. 57–66, 2015.

ACIOLI, P. S.; XAVIER, F. A.; MOREIRA, D. M. 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. Solution of physical problems by decomposition. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 27, n. 9-10, p. 145–154, 1994.

AHMED, G. S. A numerical algorithm for solving advection-diffusion equation with constant and variable coefficients. *The Open Numerical Methods Journal*, v. 4, n. 1, 2012.

ALBANI, R. A. S.; ALBANI, V. V. L.; GOMES, L. E. S.; MIGON, H. S.; SILVA NETO, A. J. Bayesian inference and wind field statistical modeling applied to multiple source estimation. *Environmental Pollution*, Elsevier, v. 321, p. 121061, 2023.

ALBANI, R. A. S.; ALBANI, V. V. L.; MIGON, H. S.; SILVA NETO, A. J. Uncertainty quantification and atmospheric source estimation with a discrepancy-based and a state-dependent adaptative mcmc. *Environmental Pollution*, Elsevier, v. 290, p. 118039, 2021.

_____. Estimation of the deposition rates of atmospheric pollutants using particle swarm optimization. 19th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, 2022.

ALBANI, R. A. S.; ALBANI, V. V. L.; SILVA NETO, A. J. Source characterization of airborne pollutant emissions by hybrid metaheuristic/gradient-based optimization techniques. *Environmental Pollution*, Elsevier, v. 267, p. 115618, 2020.

ALMEIDA, R. Caputo-hadamard fractional derivatives of variable order. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, Taylor & Francis, v. 38, n. 1, p. 1–19, 2017.

ANDERSON, D. R.; CAMRUD, E.; ULNESS, D. J. On the nature of the conformable derivative and its applications to physics. 2018.

ANDERSON, D. R.; ULNESS, D. J. Properties of the katugampola fractional derivative with potential application in quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, AIP Publishing LLC, v. 56, n. 6, p. 063502, 2015.

ANNUNZIATO, M.; GRIGOLINI, P.; WEST, B. J. Canonical and noncanonical equilibrium distribution. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 011107–1–011107–13, 2001.

ASKARI, M.; ADIBI, H. Numerical solution of advection-diffusion equation using meshless method of lines. *Iranian Journal of Science and Technology, Transactions A: Science*, Springer, v. 41, p. 457–464, 2017.

ATANGANA, A. Derivative with a new parameter: theory, methods and applications. New York: Academic Press, 2015.

ATANGANA, A.; BALEANU, D. New fractional derivatives with nonlocal and non-singular kernel: theory and application to heat transfer model. *arXiv preprint* arXiv:1602.03408, 2016.

AVCI, D.; EROĞLU, B. B. İ.; ÖZDEMIR, N. The dirichlet problem of a conformable advection-diffusion equation. Vinca Inst Nuclear Sci, 2017.

BAARS, H.; ANSMANN, A.; ENGELMANN, R.; ALTHAUSEN, D. Continuous monitoring of the boundary-layer top with lidar. *Atmospheric chemistry and Physics*, Copernicus GmbH, v. 8, n. 23, p. 7281–7296, 2008.

BABAKHANI, A.; DAFTARDAR-GEJJI, V. On calculus of local fractional derivatives. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Elsevier, v. 270, n. 1, p. 66–79, 2002.

BARAD, M. L. Project Prairie Grass, A field program in diffusion. Bedford, Massachusetts, USA, 1958. v. 1.

BARRY, R. G.; CHORLEY, R. J. Atmosfera, tempo e clima. New York, USA: Bookman Editora, 2009.

BERRYMAN, J. 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.

BERYAND, M. Y. Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere. USA: Translated for NERC-Library, EPA, from the original Russian by Leo Kanner Associates, 1976.

BEVILACQUA, L.; JIANG, M.; SILVA NETO, A.; GALEÃO, A. An evolutionary model of bi-flux diffusion processes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 38, n. 5, p. 1421–1432, 2016.

BLACKADAR, A. K. Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences. USA: Springer, 2012.

BREBBIA, C. A.; BREBBIA, C. A. Progress in Boundary Element Methods: Volume 2. New York: Springer, 1983.

BROWN, R. On the existence of molecules. *Philos. Mag.*, v. 4, p. 161–173, 1828.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Numerical Analysis. 9^a. ed. Boston: Thomson Books, 2011.

BUSKE, D. Solução gilt
t bidimensional em geometria cartesiana: Simulação da dispersão de polu
entes na atmosfera. 2008.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. *Environmental Fluid Mechanics*, Springer, v. 7, n. 1, p. 43–54, 2007.

_____. 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, 2007.

BUSKE DANIELA, R. S.; OLIVEIRA, R. E.; GUILHERME, J. W.; HARTER, F. P. Analytical solution for contaminant dispersion model in rivers and canals applying the method giltt. *International Journal of Development Research*, v. 7, n. 07, p. 13857–13864, 2017.

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

CAMARGO, R. F.; CAPELAS DE OLIVEIRA, E. Cálculo fracionário. *Livraria da Fisica, Sao Paulo*, 2015.

CANNON, R. H. Dynamics of physical systems. New York: Courier Corporation, 2003.

CAPELAS DE OLIVEIRA, E. *Funções especiais com aplicações*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.

CAPELAS DE OLIVEIRA, E.; MACHADO, J. A. T. *et al.* A review of definitions for fractional derivatives and integral. *Mathematical Problems in Engineering*, Hindawi, v. 2014, 2014.

CAPUTO, M. Linear models of dissipation whose q is almost frequency independent. *Annals of Geophysics*, v. 19, n. 4, p. 383–393, 1966.

_____. Linear models of dissipation whose q is almost frequency independent—ii. *Geophysical Journal International*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 13, n. 5, p. 529–539, 1967.

_____. Elasticitá e dissipazione (elasticity and anelastic dissipation). Zanichelli, Bologna, v. 4, p. 98, 1969.

CAPUTO, M.; FABRIZIO, M. A new definition of fractional derivative without singular kernel. *Progress in Fractional Differentiation & Applications*, v. 1, n. 2, p. 73–85, 2015.

CARVALHO, J. C.; MOREIRA, D. M. Evaluation of two semi-analytical techniques in air quality applications. *Revista Brasileira de Meteorologia*, SciELO Brasil, v. 22, n. 1, p. 10–20, 2007.

ÇENESIZ, Y.; KURT, A.; NANE, E. Stochastic solutions of conformable fractional cauchy problems. *Statistics & Probability Letters*, Elsevier, v. 124, p. 126–131, 2017.

CENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. Mecânica dos fluidos-3. [S.l.]: Amgh Editora, 2015.

CHAVES, A. S. A fractional diffusion equation to describe lévy flights. *Physics Letters* A, v. 239, p. 13–16, 1998.

CHEN, W. Fractional and fractal derivatives modeling of turbulence. arXiv preprint nlin/0511066, 2005.

CHEN, W.; SUN, H.; LI, X. Fractional derivative modeling in mechanics and engineering. China: Springer, 2022.

CHEN, Y.; YAN, Y.; ZHANG, K. On the local fractional derivative. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Elsevier, v. 362, n. 1, p. 17–33, 2010.

CHOCK, D. P.; SUN, P.; WINKLER, S. 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, C. V.; HILDEMANN, L. M.; ROBERTS, P. V. A threedimensional 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.

CHUNG, W. S. Fractional newton mechanics with conformable fractional derivative. *Journal of computational and applied mathematics*, Elsevier, v. 290, p. 150–158, 2015.

COHEN, A. M. Numerical methods for laplace transform inversion-program code only (2007). 2015.

COTTA, R. M. Integral transforms in computational heat and fluid flow. Florida, USA: CRC Press, 1993.

COTTA, R. M.; MIKHAILOV, M. D. Heat conduction: lumped analysis, integral transforms, symbolic computation. New York, USA: Wiley Chichester, 1997.

CRANK, J.; PARK, G. S. Diffusion in Polymers, Edited by J. Crank and GS Park. London, New York: Academic Press, 1968.

CSANADY, G. T. *Turbulent diffusion in the environment*. USA: Springer Science & Business Media, 1973.

DANG, Q. A.; EHRHARDT, M. Adequate numerical solution of air pollution problems by positive difference schemes on unbounded domains. *Mathematical and Computer Modelling*, Elsevier, v. 44, n. 9-10, p. 834–856, 2006.

DAVID, S. A.; LINARES, J. L.; PALLONE, E. M. d. J. A. Fractional order calculus: historical apologia, basic concepts and some applications. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 33, p. 4302–4302, 2011.

DAVIS, K. J.; LENSCHOW, D. H.; ONCLEY, S. P.; KIEMLE, C.; EHRET, G.; GIEZ, A.; MANN, J. Role of entrainment in surface-atmosphere interactions over the boreal forest. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, Wiley Online Library, v. 102, n. D24, p. 29219–29230, 1997.

DEARDORFF, J. W. Theoretical expression for the countergradient vertical heat flux. *Journal of Geophysical Research*, Wiley Online Library, v. 77, n. 30, p. 5900–5904, 1972.

DEGRAZIA, G. A.; MORAES, O. L. L. A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 58, n. 3, p. 205–214, 1992.

DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, American Meteorological Society, v. 40, n. 7, p. 1233–1240, 2001.

DEGRAZIA, G. A.; VELHO, H. F. C.; CARVALHO, J. C. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. *Contributions to Atmospheric Physics*, Vieweg, v. 70, n. 1, p. 57–64, 1997.

DEMUTH, C. 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.

DUBKOV, A. A.; SPAGNOLO, B.; UCHAIKIN, V. V. Lévy flight superdiffusion: an introduction. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, World Scientific, v. 18, n. 09, p. 2649–2672, 2008.

DYKE, M. V. Perturbation methods in fluid mechanics academic press. *New York*, p. 110, 1964.

DZRBASHYAN, M. M.; NERSESYAN, A. B. Fractional derivatives and the cauchy problem for fractional differential equations. *Izv. Acad. Sci. Arm. SSR Mat*, v. 3, p. 3–28, 1968.

EINSTEIN, A. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Annalen der physik*, v. 4, 1905.

EVANGELISTA, L. R.; LENZI, E. K. Fractional diffusion equations and anomalous diffusion. [S.l.]: Cambridge University Press, 2018.

GHORBANI, A. Beyond adomian polynomials: he polynomials. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 39, n. 3, p. 1486–1492, 2009.

GOMES, R. C.; SILVA, A. F. D.; KOUYATÉ, M.; DEMOUCHY, G.; MÉRIGUET, G.; AQUINO, R.; DUBOIS, E.; NAKAMAE, S.; ROGER, M.; DEPEYROT, J. *et al.* Thermodiffusion of repulsive charged nanoparticles—the interplay between single-particle and thermoelectric contributions. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Royal Society of Chemistry, v. 20, n. 24, p. 16402–16413, 2018.

GOULART, A. G. O.; LAZO, M. J.; SUAREZ, J. M. S.; MOREIRA, D. M. Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 477, p. 9–19, 2017.

GRISOGONO, B.; OERLEMANS, J. Katabatic flow: analytic solution for gradually varying eddy diffusivities. *Journal of the atmospheric sciences*, American Meteorological Society, v. 58, n. 21, p. 3349–3354, 2001.

GRUNWALD, A. K. Uber"begrente"derivationen und deren anwedung. Zangew Math und Phys, v. 12, p. 441–480, 1867.

GRYNING, S.-E. *Elevated source SF6-tracer dispersion experiments in the Copenhagen area.* Dinamarca: Risø National Laboratory Roskilde Denmark, Report R-446, 1981.

GRYNING, S.-E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, v. 23, n. 4, p. 651–660, 1984.

GUERRERO, J. S. P.; PIMENTEL, L. C. G.; OLIVEIRA JÚNIOR, J. F.; HEILBRON FILHO, P. F. L.; ULKE, A. G. A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 55, p. 201–212, 2012.

GUN, L.; KAIKAI, Z.; RUI, G. Simulation on drug molecules permeability of the blood-brain-barrier. In: . [s.n.], 2017. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/ CorpusID:102803101>.

HANNA, S. 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.

HARTLEY, T. T.; LORENZO, C. F. A solution to the fundamental linear fractional order differential equation. [S.l.], 1998.

HENRY, R. C.; WANG, Y.-J.; GEBHART, K. 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.

HEYDARIAN, M.; ABAZARI, R.; HOSEINI, S. Solution of Parabolic Partial Differential Equation. Tese (Doutorado) — University of Aston, Birmingham, 1981.

HUANG, C. On solutions of the diffusion–deposition equation for point sources in turbulent shear flow. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, American Meteorological Society, v. 38, n. 2, p. 250–254, 1999.

HUANG, C. H. A theory of dispersion in turbulent shear flow. *Atmospheric Environment* (1967), Elsevier, v. 13, n. 4, p. 453–463, 1979.

HUEBNER, K. H.; DEWHIRST, D. L.; SMITH, D. E.; BYROM, T. G. The finite element method for engineers. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2001.

ISNARD, A. A. Investigação computacional do escoamento e da dispersão de poluentes atmosféricos sobre topografias complexas. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2004.

IYIOLA, O.; TASBOZAN, O.; KURT, A.; ÇENESIZ, Y. On the analytical solutions of the system of conformable time-fractional robertson equations with 1-d diffusion. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 94, p. 1–7, 2017.

JIANG, M.; BEVILACQUA, L.; SILVA NETO, A. J.; GALEÃO, A. C. R.; ZHU, J. Bi-flux theory applied to the dispersion of particles in anisotropic substratum. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 64, p. 121–134, 2018.

JUMARIE, G. On the representation of fractional brownian motion as an integral with respect to (dt) a. *Applied Mathematics Letters*, Elsevier, v. 18, n. 7, p. 739–748, 2005.

KAIMAL, J. C.; WYNGAARD, J. C.; HAUGEN, D. A.; COTÉ, O. R.; IZUMI, Y.; CAUGHEY, S. J.; READINGS, C. Turbulence structure in the convective boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, v. 33, n. 11, p. 2152–2169, 1976.

KATUGAMPOLA, U. N. New approach to a generalized fractional integral. *Applied* mathematics and computation, Elsevier, v. 218, n. 3, p. 860–865, 2011.

KHALIL, R.; HORANI, M. A.; YOUSEF, A.; SABABHEH, M. A new definition of fractional derivative. *Journal of computational and applied mathematics*, Elsevier, v. 264, p. 65–70, 2014.

KILBAS, A. A.; MARICHEV, O. I.; SAMKO, S. G. Fractional integrals and derivatives (theory and applications). [S.l.]: Gordon and Breach, Switzerland, 1993.

KOLMOGOROV, A. N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 434, n. 1890, p. 9–13, 1991.

KUMAR, P.; SHARAN, M. An analytical model for dispersion of pollutants from a continuous source in the atmospheric boundary layer. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 466, n. 2114, p. 383–406, 2010.

KUSNEZOV, D.; BULGAC, A.; DANG, G. D. Quantum lévy processes and fractional kinetics. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, p. 1136–1139, 1999.

LAMB, R. G. Diffusion in the convective boundary layer. In: *Atmospheric Turbulence* and Air Pollution Modelling. Atmospheric Sciences Library: Springer, 1984. p. 159–229.

LANGEVIN, P. Sur la théorie du mouvement brownien. *Compt. Rendus*, v. 146, p. 530–533, 1908.

LEITE, M. d. F. S.; MOREIRA, D. M. Comparison between vertical eddy diffusivities in the simulation of pollutant dispersion in a convective boundary layer. *Revista Brasileira de Meteorologia*, SciELO Brasil, v. 31, p. 518–526, 2016.

LETNIKOV, A. V. Theory of differentiation with an arbtraly indicator. *Matem Sbornik*, v. 3, p. 1–68, 1868.

LI, C.; DENG, W. Remarks on fractional derivatives. *Applied mathematics and computation*, Elsevier, v. 187, n. 2, p. 777–784, 2007.

LIU, C.-s. Counterexamples on jumarie's two basic fractional calculus formulae. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, Elsevier, v. 22, n. 1-3, p. 92–94, 2015.

LORENZO, C. F. *Initialized fractional calculus*. USA: NASA Glenn Research Center, 2000.

MANDELBROT, B. B. *The fractal geometry of nature*. New York: WH freeman, 1982. v. 1.

MANGIA, C.; MOREIRA, D.; SCHIPA, I.; DEGRAZIA, G.; TIRABASSI, T.; RIZZA, U. 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.

MARQUES FILHO, E. P. Investigação da camada limite planetária convectiva com modelo LES aplicado à dispersão de poluentes. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2004.
MELLO, K. B. d. Solução da equação de difusão-advecção para uma CLP não-homogênea e não-estacionária pelo método GILTT. Dissertação (Mestrado) — UFRGS, 2006.

METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics reports*, Elsevier, v. 339, n. 1, p. 1–77, 2000.

MIKHAILOV, M. D.; OZISIK, M. N. Unified analysis and solutions of heat and mass diffusion. 1984.

MILLER, K. S.; ROSS, B. An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations. [S.1.]: Wiley, 1993.

MÖLLER, S. V.; SILVESTRINI, J. H. Turbulência: fundamentos. *Coleçao Cadernos de Turbulência. Associação Brasileira de Ciências Mecânicas-ABCM. Rio de Janeiro*, v. 4, p. 1–32, 2004.

MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. *Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci. USSR*, v. 151, n. 163, p. e187, 1954.

MOREIRA, D.; MORET, M. 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, D.; VILHENA, M. Air pollution and turbulence: modeling and applications. [S.l.]: CRC Press, 2009.

MOREIRA, D.; XAVIER, P.; PALMEIRA, A.; NASCIMENTO, E. New approach to solving the atmospheric pollutant dispersion equation using fractional derivatives. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 144, p. 118667, 2019.

MOREIRA, D. M.; CARVALHO, J. C.; GOULART, A. G.; TIRABASSI, T. 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, p. 285–297, 2005.

MOREIRA, D. M.; FERREIRA NETO, P. V.; CARVALHO, J. da C. Analytical solution of the eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation. *Environmental Modelling & Software*, Elsevier, v. 20, n. 9, p. 1159–1165, 2005.

MOREIRA, D. M.; MORAES, A. C.; GOULART, A. G.; ALBUQUERQUE, T. T. de A. 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, D. M.; RIZZA, U.; VILHENA, M.; GOULART, A. Semi-analytical model for pollution dispersion in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 14, p. 2673–2681, 2005.

MOREIRA, D. M.; SANTOS, C. A. G. 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, D. M.; TIRABASSI, T.; MORAES, M. R. d. Meteorologia e poluição atmosférica. *Ambiente & Sociedade*, Associação Nacional de Pós-Graduação e Pesquisa em Ambiente e Sociedade, v. 11, n. 1, p. 1–13, 2008.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The giltt solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary pbl. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 40, n. 17, p. 3186–3194, 2006.

_____. The state-of-art of the giltt method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. *Atmospheric Research*, Elsevier, v. 92, n. 1, p. 1–17, 2009.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; COTTA, R. Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new giltt method. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 34, p. 6289–6294, 2005.

MUSRAINI, M.; EFENDI, R.; LILY, E.; HIDAYAH, P. Classical properties on conformable fractional calculus. *Pure and Applied Mathematics Journal*, Science Publishing Group, v. 8, n. 5, p. 83, 2019.

NASCIMENTO, E. G.; SOUZA, N. B.; KITAGAWA, Y. K.; MOREIRA, D. M. Simulated dispersion of the gas released by the spacex falcon9 rocket explosion. *Journal of Spacecraft and Rockets*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, p. 1–9, 2018.

NASCIMENTO, E. G. S.; MOREIRA, D. M.; ALBUQUERQUE, T. T. de A. The development of a new model to simulate the dispersion of rocket exhaust clouds. *Aerospace Science and Technology*, Elsevier, v. 69, p. 298–312, 2017.

NIEUWSTADT, F. The computation of the friction velocity u^{*} and the temperature scale t^{*} from temperature and wind velocity profiles by least-square methods. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 14, n. 2, p. 235–246, 1978.

NIEUWSTADT, F. T. M. 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.

NUNES, A. B. Crescimento da camada limite convectiva: estudo analítico e numérico. *Meteorologia. São*, 2008.

OLDHAM, K.; SPANIER, J. The fractional calculus theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order. Elsevier, 1974.

OLIVEIRA, D.; CAPELAS DE OLIVEIRA, E. Hilfer-katugampola fractional derivatives. *Computational and Applied Mathematics*, Springer, v. 37, n. 3, p. 3672–3690, 2018.

OLIVEIRA, D. S.; CAPELAS DE OLIVEIRA, E. On the generalized (k, ρ)-fractional derivative. *Progr. Fract. Differ. Appl*, v. 4, p. 133–145, 2018.

_____. On a caputo-type fractional derivative. Advances in Pure and Applied Mathematics, De Gruyter, v. 10, n. 2, p. 81–91, 2019.

OLIVEIRA, F. A.; FERREIRA, R. M.; LAPAS, L. C.; VAINSTEIN, M. H. Anomalous diffusion: A basic mechanism for the evolution of inhomogeneous systems. *Frontiers in Physics*, Frontiers Media SA, v. 7, p. 18, 2019.

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

PAINTER, S. Evidence of non-gaussian scaling behaviour in heterogeneous sedimentary formations. *Water Resourc. Res.*, v. 32, p. 1183–1195, 1996.

PAIS, A. Sutil é o senhor. ciência e a vida de einstein. *Editora Nova Fronteira*, Rio de Janeiro, 1995.

PALMEIRA, A.; XAVIER, P.; MOREIRA, D. Simulation of atmospheric pollutant dispersion considering a bi-flux process and fractional derivatives. *Atmospheric Pollution Research*, Elsevier, v. 11, n. 1, p. 57–66, 2020.

PANOFSKY, H. A. Atmospheric turbulence. Models and methods for engineering applications., Wiley, New York, v. 397, 1984.

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

PASQUILL, F.; SMITH, F. B. Atmospheric diffusion.: Study of the dispersion of windborne material from industrial and other sources. *JOHN WILEY & SONS, 605 THIRD AVE., NEW YORK, NY 10016, USA. 1983.*, 1983.

PHILIBERT, J. One and a half century of diffusion: Fick, einstein before and beyond. Fundam, 2006.

PIESSENS, R. Gaussian quadrature formulas for the numerical integration of bromwich's integral and the inversion of the laplace transform. *Journal of Engineering Mathematics*, Springer, v. 5, n. 1, p. 1–9, 1971.

PIMENTEL, L. C. G.; GUERRERO, J. S. P.; ULKE, A. G.; DUDA, F. P.; HEILBRON FILHO, P. F. L. 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.

PODLUBNY, I. Fractional differential equations, mathematics in science and engineering. [S.l.]: Academic press New York, 1999.

_____. Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation. arXiv preprint math/0110241, 2001.

RAMOS, P. F. P. Cálculo fracionário aplicado ao problema da tautócrona. *CQD-Revista Eletrônica Paulista de Matemática*, 2012.

REIS, F. A.; BOLSTER, D.; VOLLER, V. R. Anomalous behaviors during infiltration into heterogeneous porous media. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 113, p. 180–188, 2018.

RICHARDSON, L. F. 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.; GIOIA, G.; MANGIA, C.; MARRA, G. P. 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.

RODRIGUES, F. G.; OLIVEIRA, E. de. Introdução às técnicas do cálculo fracionário para estudar modelos da física matemática. *Revista brasileira de ensino de física*, SciELO Brasil, v. 37, p. 3305–1, 2015.

ROSS, B. A brief history and exposition of the fundamental theory of fractional calculus. In: SPRINGER. *Fractional Calculus and Its Applications: Proceedings of the International Conference Held at the University of New Haven, June 1974.* [S.I.], 2006. p. 1–36.

ROSSATO, R.; LENZI, M. K.; EVANGELISTA, L. R.; LENZI, E. K. Fractional diffusion equation in a confined region: surface effects and exact solutions. *Physical Review E*, APS, v. 76, n. 3, p. 032102, 2007.

SALZER, H. E. Orthogonal polynomials arising in the numerical evaluation of inverse laplace transforms. *Mathematics of Computation*, v. 9, n. 52, p. 164–177, 1955.

_____. Additional formulas and tables for orthogonal polynomials originating from inversion integrals. *Journal of Mathematics and Physics*, Wiley Online Library, v. 40, n. 1-4, p. 72–86, 1961.

SCHERER, R.; KALLA, S. L.; TANG, Y.; HUANG, J. The grünwald–letnikov method for fractional differential equations. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 62, n. 3, p. 902–917, 2011.

SCHETZ, J. A.; BOWERSOX, R. D. *Boundary layer analysis*. [S.l.]: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2011.

SCHIFF, J. L. *The Laplace transform: theory and applications*. [S.1.]: Springer Science & Business Media, 1999.

SCRIVEN, R. A.; FISHER, B. E. A. 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.

SEGATTO, C. F.; VILHENA, M. T. The state-of-the-art of the ltsn method. Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Senda Editorial, Madrid, p. 1618–1631, 1999.

SEO, K.-H.; BOWMAN, K. P. Lévy flights and anomalous diffusion in the stratosphere. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, Wiley Online Library, v. 105, n. D10, p. 12295–12302, 2000.

SHARAN, M.; GOPALAKRISHNAN, S. Mathematical modeling of diffusion and transport of pollutants in the atmospheric boundary layer. *Pure and Applied Geophysics*, Springer, v. 160, p. 357–394, 2003.

SHARAN, M.; KANSA, E.; GUPTA, S. 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, M.; MODANI, M. 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.

SHARAN, M.; YADAV, A. K.; SINGH, M. P.; AGARWAL, P.; NIGAM, S. A mathematical model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 30, n. 8, p. 1209–1220, 1996.

SHLESINGER, M. F.; KLAFTER, J.; WEST, B. 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.

SHLESINGER, M. F.; WEST, B.; KLAFTER, J. Lévy dynamics of enhanced diffusion: Application to turbulence. *Physical Review Letters*, APS, v. 58, n. 11, p. 1100, 1987.

SILVA, L. G. da; KNUPP, D. C.; BEVILACQUA, L.; GALEÃO, A. C. N. R.; SILVA NETO, A. J. Inverse problem of an anomalous diffusion model employing lightning optimization algorithm. *Computational intelligence, optimization and inverse problems with applications in engineering*, Springer, p. 185–200, 2019.

SMITH, F. 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.

SMOLUCHOWSKI, M. Sur le chemin moyen parcouru par les molécules d'un gaz et sur son rapport avec la théorie de la diffusion. *Bull. Int. Acad. Sci*, v. 1, n. 1, p. 202–213, 1906.

SOLEDADE, A. L. S.; MOREIRA, D. M. Fractional atmospheric pollutant dispersion equation in a vertically inhomogeneous planetary boundary layer: an analytical solution using conformable derivatives. *Water, Air, & Soil Pollution*, Springer, v. 233, n. 9, p. 395, 2022.

SOLOMON, T. H.; WEEKS, E. R.; SWINNEY, H. L. Observation of anomalous diffusion and lévy flights in a two-dimensional rotating flow. *Physical Review Letters*, v. 71, p. 3975–3978, 1993.

_____. Chaotic advection in a two-dimensional flow: Lévy flights and anomalous diffusion. *Physica D*, v. 76, p. 70–84, 1994.

SONIN, N. Y. On differentiation with arbitrary index. *Moscow Matem. Sbornik*, v. 6, n. 1, p. 1–38, 1869.

SOUSA, J. V. d. C.; CAPELAS DE OLIVEIRA, E. Leibniz type rule: ψ -hilfer fractional operator. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, Elsevier, v. 77, p. 305–311, 2019.

SPOHN, H. Surface dynamics below the roughening transition. *Journal de Physique I*, EDP Sciences, v. 3, n. 1, p. 69–81, 1993.

STEPHENSON, J. 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.

STROUD, A. H.; SECREST, D. Gaussian Quadrature Formulas: By AH Stroud and Don Secrest. [S.l.]: Prentice-Hall, 1966.

STULL, R. B. An introduction to boundary layer meteorology. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 1988. v. 13.

____. Dordrecht, Holanda: Kluwer Academic Publishers: Springer Science & Business Media, 2012. v. 13.

SUN, H.; HAO, X.; ZHANG, Y.; BALEANU, D. Relaxation and diffusion models with non-singular kernels. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 468, p. 590–596, 2017.

TALBOT, A. The accurate numerical inversion of laplace transforms. *IMA Journal of Applied Mathematics*, Oxford University Press, v. 23, n. 1, p. 97–120, 1979.

TARASOV, V. E. No nonlocality. no fractional derivative. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 62, p. 157–163, 2018.

TAYLOR, G. I. Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the london* mathematical society, Wiley Online Library, v. 2, n. 1, p. 196–212, 1922.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L.; LUMLEY, J. L. et al. A first course in turbulence. [S.l.]: MIT press, 1972.

TEODORO, G. S.; MACHADO, J. T.; CAPELAS DE OLIVEIRA, E. A review of definitions of fractional derivatives and other operators. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 388, p. 195–208, 2019.

TEODORO, G. S.; OLIVEIRA, D.; CAPELAS DE OLIVEIRA, E. Sobre derivadas fracionárias. *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, v. 40, n. 2, 2018.

TIRABASSI, T. Analytical air pollution advection and diffusion models. *Water, Air, & Soil Pollution*, Springer, v. 47, n. 1, p. 19–24, 1989.

_____. Operational advanced air pollution modeling. *Pure and Applied Geophysics*, Springer, v. 160, p. 5–16, 2003.

TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. 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.; RIZZA, U. Boundary layer parameterization for a non-gaussian puff model. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, American Meteorological Society, v. 36, n. 8, p. 1031–1037, 1997.

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.

TROEN, I. B.; MAHRT, L. A simple model of the atmospheric boundary layer; sensitivity to surface evaporation. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 37, n. 1-2, p. 129–148, 1986.

ULDEN, A. V. 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.

VALKÓ, P. P.; ABATE, J. Comparison of sequence accelerators for the gaver method of numerical laplace transform inversion. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 48, n. 3-4, p. 629–636, 2004.

VAYTET, N.; COMMERÇON, B.; MASSON, J.; GONZÁLEZ, M.; CHABRIER, G. Protostellar birth with ambipolar and ohmic diffusion. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 615, p. A5, 2018.

VENKATRAM, A. Lectures on air pollution modeling. [S.I.]: Springer, 2015.

WALLACE, J. M.; HOBBS, P. V. Atmospheric science: an introductory survey. [S.l.]: Elsevier, 2006. v. 92.

WEIL, J. C.; BROWER, R. An updated gaussian plume model for tall stacks. *Journal of the Air Pollution Control Association*, Taylor & Francis, v. 34, n. 8, p. 818–827, 1984.

WEST, B. J. Colloquium: Fractional calculus view of complexity: A tutorial. *Reviews of modern physics*, APS, v. 86, n. 4, p. 1169, 2014.

WEST, B. J.; BOLOGNA, M.; GRIGOLINI, P. *Physics of fractal operators.* [S.l.]: Springer, 2003. v. 10.

WEST, B. J.; GRIGOLINI, P.; METZLER, R.; NONNENMACHER, T. F. Fractional diffusion and lévy stable processes. *Physical Review E*, v. 55, p. 99–106, 1997.

WEYMAR, G. J. Uma solução da equação multidimensional de advecção-difusão para a simulação da dispersão de contaminantes reativos na camada limite atmosférica. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Escola de Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica., 2016.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, Wiley Online Library, v. 102, n. 432, p. 427–445, 1976.

WORTMANN, S.; MOURA, A. B. D.; VILHENA, M. T. M. B. d. Solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficinte de difusão variável. In: *Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas (8.: 2000: Porto Alegre, RS).[Anais].* Porto Alegre: UFRGS, 2000.

WORTMANN, S.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D.; BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the pbl. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 12, p. 2171–2178, 2005.

XAVIER, P. H. F.; NASCIMENTO, E. G. S.; MOREIRA, D. M. A model using fractional derivatives with vertical eddy diffusivity depending on the source distance applied to the dispersion of atmospheric pollutants. *Pure and Applied Geophysics*, Springer, v. 176, n. 4, p. 1797–1806, 2019.

YANG, X.-J.; SRIVASTAVA, H. M.; MACHADO, J. A new fractional derivative without singular kernel: application to the modelling of the steady heat flow. *arXiv preprint arXiv:1601.01623*, 2015.

YEH, G.-T.; HUANG, C.-H. Three-dimensional air pollutant modeling in the lower atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 9, n. 4, p. 381–390, 1975.

YU, X.; LEITNER, D. 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.

ZANETTE, D. H.; ALEMANY, P. A. Thermodynamics of anomalous diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, v. 75, p. 366–369, 1995.

ZASLAVSKY, G. M. Hamiltonian Chaos and Fractional Dynamics. [S.I.]: Oxford University Press, 2005.

ZHOKH, A. A.; TRYPOLSKYI, A. I.; STRIZHAK, P. E. Asymptotic green's functions for time-fractional diffusion equation and their application for anomalous diffusion problem. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 475, p. 77–81, 2017.

ZHOU, H. W.; YANG, S.; ZHANG, S. Q. Conformable derivative approach to anomalous diffusion. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 491, p. 1001–1013, 2018.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. *The Finite Element Method. Butterworth.* [S.l.]: Heinemann, 2000.

Uma nova perspectiva na solução da equação de advecção-difusão fracionária usando o método GILTT e derivadas conformáveis

André Luiz Santos da Soledade

Salvador, Março 2024.