



CENTRO UNIVERSITÁRIO SENAI CIMATEC

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM

COMPUTACIONAL E TECNOLOGIA INDUSTRIAL

Mestrado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

Dissertação de mestrado

**Uma solução analítica da equação de difusão-advecção
aplicada em problemas atmosféricos**

Apresentada por: Palmira Maria de Santana Acioli

Orientador: Dr. Davidson Martins Moreira

Fevereiro de 2018

Palmira Maria de Santana Acioli

Uma solução analítica da equação de difusão-advecção aplicada em problemas atmosféricos

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

Área de conhecimento: Interdisciplinar

Orientador: Dr. Davidson Martins Moreira

Centro Universitário SENAI CIMATEC

Salvador
Centro Universitário SENAI CIMATEC
2018

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do Centro Universitário SENAI CIMATEC

A181s Acioli, Palmira Maria de Santana

Uma solução analítica da equação de difusão-advecção aplicada em problemas atmosféricos / Palmira Maria de Santana Acioli. – Salvador, 2018.

72 f. : il. color.

Orientador: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira.

Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial) – Programa de Pós-Graduação, Centro Universitário SENAI CIMATEC, Salvador, 2018.
Inclui referências.

1. Método da decomposição por Laplace. 2. Equação de difusão-advecção. 3. Derivadas fracionárias. 4. Camada limite planetária. I. Centro Universitário SENAI CIMATEC. II. Moreira, Davidson Martins. III. Título.

CDD: 620.00113

Centro Universitário SENAI CIMATEC

Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

Mestrado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

A Banca Examinadora, constituída pelos professores abaixo listados, leram e recomendam a aprovação do Dissertação de mestrado, intitulada “Uma solução analítica da equação de difusão-advecção aplicada em problemas atmosféricos”, apresentada no dia 23 de Fevereiro de 2018, como requisito parcial para a obtenção do título de **Mestre em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial**.

Orientador:

Prof.º Dr. Davidson Martins Moreira
Centro Universitário SENAI CIMATEC

Membro interno da Banca:

Prof.º Dr. Marcelo Albano Moret Simões Gonçalves
Centro Universitário SENAI CIMATEC

Membro externo da Banca:

Prof.º Dr. Taciana Toledo de Almeida Albuquerque
Universidade Federal de Minas Gerais

Agradecimentos

A Deus, por ter colocado em meu caminho pessoas tão especiais, as quais seja por um incentivo ou ensinamentos possibilitaram a realização deste trabalho.

Aos meus filhos, Davi e Alice, por me tornar mais forte e feliz.

Ao meu esposo Renan, pelo carinho, amizade e cumplicidade compartilhados em todos estes anos.

Aos meus pais, Socorro e Augusto, pelo amor, incentivo e torcida não apenas durante a realização deste trabalho, mas por toda a minha vida.

Ao meu orientador Prof. Dr. Davidson Moreira, por ser um exemplo enquanto professor e pesquisador, pelos ensinamentos, pelo apoio e pela confiança no meu trabalho.

A toda minha família, pelo apoio e incentivo.

A todos os colegas do curso pelos momentos de convívio e amizade.

Salvador, Brasil
23 de Fevereiro de 2018

Palmira Maria de Santana Acioli

Resumo

Neste trabalho apresenta-se uma solução analítica da equação de difusão-advecção de ordem inteira e fracionária para o estudo da dispersão de poluentes na camada limite planetária. A solução da equação é obtida através do método de decomposição por Laplace e perturbação por homotopia, considerando-se a derivada de Caputo no caso fracionário. Na obtenção da solução são utilizados dois tipos de coeficientes de difusão: um constante e outro dependente da distância longitudinal da fonte ($K \propto x$ e $K \propto x^2$), na equação de ordem inteira, e um constante na de ordem fracionária. Para validação do modelo os resultados foram confrontados com dados experimentais da literatura (Copenhague e Prairie Grass). No experimento de Copenhague, em condições moderadamente instáveis, os melhores resultados foram obtidos na solução sob a influência do efeito de memória no coeficiente de difusão dependente da distância da fonte ($K \propto x$) e na solução com coeficiente de difusão constante na equação com derivada fracionária. No entanto, no experimento de Prairie Grass, de forte convecção, os melhores resultados foram obtidos somente com o coeficiente de difusão dependente da distância da fonte que considera forte convecção ($K \propto x^2$).

Palavras-chave: Método da decomposição por Laplace; equação de difusão-advecção; derivadas fracionárias; camada limite planetária.

Abstract

In this work it is presented an analytical solution of the diffusion-advection equation of integer and fractional order for the study of dispersion of pollutants in the planetary boundary layer. The solution of the equation is obtained by Laplace decomposition method and perturbation by homotopy, considering the derivative of Caputo in the fractional case. In order to obtain the solution, two types of diffusion coefficients are used: one constant and one dependent on the longitudinal distance of the source ($K \propto x$ e $K \propto x^2$), in the integer order equation, and a constant in the fractional order. To validate the model, results were compared with experimental data from the literature (Copenhagen and Prairie Grass). In the Copenhagen experiment, in moderately unstable conditions, the best results were obtained in the solution under the influence of the memory effect on the diffusion coefficient dependent on the source distance ($K \propto x$) and on the solution with constant diffusion coefficient in the equation with derivative fractional. However, in the strongly convected Prairie Grass experiment, the best results were obtained only with the distance-dependent diffusion coefficient of the source considering strong convection ($K \propto x^2$).

Keywords: Laplace decomposition method; diffusion-advection equation; fractional derivatives, atmospheric boundary layer.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Definição do problema	2
1.2	Objetivo	3
1.2.1	Objetivos específicos	3
1.3	Importância da pesquisa	3
1.4	Aspectos metodológicos	4
1.5	Organização da Dissertação de mestrado	4
2	Revisão Bibliográfica	6
3	Camada Limite Planetária (CLP)	10
3.1	Camada Limite Planetária	10
3.2	Camada Limite Convectiva	12
3.2.1	Camada Superficial (CS)	12
3.2.2	Camada de Convecção Livre (CCL)	13
3.2.3	Camada de Mistura (CM)	13
3.2.4	Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE)	14
3.3	Camada Residual (CR)	14
3.4	Camada Limite Estável (CLE)	14
3.5	Generalidades da dispersão na CLP	14
4	Modelo matemático	17
4.1	Derivada Fracionária - Definição de Caputo	17
4.1.1	Função de Mittag-Leffer	17
4.1.2	Transformada de Laplace da derivada de Caputo	18
4.2	Método da Decomposição por Laplace (MDL)	18
4.2.1	Equação Diferencial Parcial de ordem inteira	18
4.2.2	Equação Diferencial Parcial de ordem fracionária	20
5	Implementação do modelo matemático	22
5.1	A equação de difusão-advecção 2D estacionária	23
5.2	Equação de difusão-advecção com coeficiente de difusão constante	24
5.3	Equação de difusão-advecção com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte	27
5.4	Equação de difusão-advecção fracionária com coeficiente de difusão constante	30
5.5	Parametrização da turbulência	33
6	Validação do modelo	36
6.1	Índices Estatísticos	36
6.2	Resultados	37
6.2.1	Experimento de Copenhagen	37
6.2.2	Experimento de Prairie Grass	46
7	Conclusões	53

Referências

55

Lista de Tabelas

6.1	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagem	38
6.2	Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Copenhagen. . .	43
6.3	Parâmetros micrometeorológicos do experimento Prairie Grass.	47
6.4	Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Prairie Grass. . .	51

Lista de Figuras

3.1	Divisão da troposfera. Fonte Stull, 2012. Figura adaptada	10
3.2	Evolução temporal da CLP. Fonte Stull, 2012	11
3.3	Comportamento da pluma dispersada na CLC	15
3.4	Comportamento da pluma dispersada na CR	15
3.5	Comportamento da pluma dispersada na CLE	16
5.1	Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes	23
6.1	Experimento Copenhagen. Fonte: Figura adaptada de Gryning e Lyck . . .	39
6.2	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58), com velocidade medida 10 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.	39
6.3	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27),), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58), com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.	40
6.4	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.43), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.27), com velocidade medida 10 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.	40
6.5	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.43), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.59), com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.	41
6.6	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58) com velocidade medida 10 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.	41
6.7	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58) com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen	42
6.8	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), para $\alpha = 0.9$, utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58), com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.	42
6.9	Gráfico das concentrações Observadas (C_o) em função da distância da fonte (x), para o experimento 1 de Copenhagen, com e a velocidade medida 10 m. Considerando-se as Eq. (5.27) e Eq. (5.43), utilizando os coeficientes de difusão da Eq. (5.58) e Eq. (5.59) respectivamente.	44
6.10	Gráfico das concentrações Observadas (C_o) em função da distância da fonte (x), para o experimento 1 de Copenhagen, com e a velocidade medida 115 m. Considerando-se as Eq. (5.27) e Eq. (5.43), utilizando os coeficientes de difusão da Eq. (5.58) e Eq. (5.59) respectivamente.	45

6.11	Gráfico das concentrações observadas (C_o) em função da distância da fonte (x) em diferentes ordens da derivada, para o experimento 1 de Copenhagen, com e a velocidade medida 10 m. Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq. (5.58).	45
6.12	Gráfico das concentrações observadas (C_o) em função da distância da fonte (x) em diferentes ordens da derivada, para o experimento 1 de Copenhagen, com e a velocidade medida 115 m. Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq. (5.58).	46
6.13	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq.(5.58). Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.	48
6.14	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq.(5.6) Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.	49
6.15	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq.(5.60) Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.	49
6.16	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando os coeficiente de difusão das Eq. (5.59), Eq.(5.59) e Eq.(5.60). Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.	50
6.17	Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.58)) Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.	50
6.18	Concentração adimensional integrada lateralmente ($C_y = cUz_i/Q$) em função da distância adimensional da fonte ($X = xw_*/Uz_i$) para o modelo com coeficiente de difusão constante K , modelo com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte ($K \propto x$) e modelo com coeficiente de difusão para fonte baixa ($K \propto x^2$). Os resultados fornecidos são comparados com os valores de concentração na forma adimensional observados durante o experimento de Prairie Grass.	52

Lista de Siglas

ADMM	<i>Analytical Dispersion Multilayer Model</i>
AL	Atmosfera Livre
CCL	Camada de Convecção Livre
CLA	Camada Limite Atmosféricas
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
Co	Concentração Observada
COR	Coeficiente de Correlação
Cp	Concentração Preditas
CR	Camada Residual
CS	Camada Superficial
EDA	Equação de Difusão-Advecção
EDP	Equações Diferencias Parcial
EXP	Experimento
FAT2	Fator de 2
FB	Desvio Fracional
FS	Desvio Padrão Fracional
GITT	Generalized Integral Transform Technique
HPM	Método de perturbação de homotopia
L	Transformada de Laplace
L_{M0}	Comprimento de Monin- Obukhov
MDL	Método da decomposição por Laplace
NMSE	Erro quadrático Médio Normalizado
SF_6	Gás traçador Hexafluoreto de Enxofre
SO_2	Dióxido de enxofre
US EPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>
ZE	Camada Interfacial de Entranhamento

Introdução

A dispersão de poluentes representa um dos grandes problemas para as comunidades urbanas e industriais, pois, afeta de forma direta a qualidade de vida dos seres vivos assim como o nosso planeta ([BOBBINK; HORNUNG; ROELOFS, 1998](#)).

O rápido avanço tecnológico e o aumento da urbanização dos últimos anos, ocasionou um o aumento no consumo de energia e também de emissões de poluentes provenientes da queima de combustíveis fósseis por fontes fixas (como as indústrias) e por fontes móveis (como os veículos automotores), elevando assim os níveis de poluentes na atmosfera. Atualmente, aproximadamente 50% da população do planeta vive em cidades e aglomerados urbanos e estão expostas a níveis progressivamente maiores de poluentes do ar ([SALVI; BARNES, 2009](#)).

A baixa qualidade do ar é um dos principais fatores causadores de doenças cardiovasculares agudas e crônicas ([LEWTAS, 2007](#)), doenças respiratórias como bronquite, rinite e asma ([ARBEX *et al.*, 2012](#)), durante a gestação pode comprometer o desenvolvimento fetal e ser causa de retardo de crescimento intrauterino, prematuridade, baixo peso ao nascer, anomalias congênitas e, nos casos mais graves, óbito intrauterino ou perinatal ([ŠRÁM *et al.*, 2005](#)).

Em 2009, pesquisas apontavam que a poluição ambiental externa era responsável por aproximadamente 1,15 milhões de óbitos/ano em todo o mundo (correspondendo a cerca de 2% do total de óbitos)([ORGANIZATION, 2009](#)). Em 2016 segundo a pesquisa realizada pelo *Global Burden of Disease* esse número subiu para 5,5 milhões óbitos/ano (correspondendo a cerca de 7,49% do total de óbitos), a maior parte das mortes ocorreu em países de baixa renda e média, onde a poluição está associada a até 25% das mortes ([LANDRIGAN *et al.*, 2017](#)).

No Brasil, a Organização Mundial da Saúde estima que a poluição atmosférica cause cerca de 20 mil óbitos/ano, valor aproximadamente cinco vezes superior ao número de óbitos estimado pelo tabagismo ambiental/passivo, e 10,7 mil óbitos/ano decorrentes da poluição do ar em ambientes internos ([ÖBERG *et al.*, 2011](#))([ARBEX *et al.*, 2012](#)) em 2011, já em 2017 esse número subiu para 100 mil óbitos/ano. O Brasil ficou na 148ª posição do ranking de países com maior proporção de mortes relacionadas à poluição, atrás de outras nações da América do Sul, como Uruguai, Chile e Equador ([COHEN *et al.*, 2017](#)).

No planeta, a poluição ocasiona danos diretos ao ecossistema: como chuva ácida, que é responsável pela morte de plantas e animais; alterações climáticas, provocando o aumento da temperatura mundial (fenômeno conhecido como aquecimento global), derretimento de gelo das calotas polares; aumento no nível de água dos oceanos; desertificação (CHANGE, 2014).

Neste contexto, a modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera é importante e desempenha um papel fundamental em estratégias para redução ou eliminação dos gases e seus efeitos nocivos aos seres vivos e ao meio ambiente. Este processo geralmente é modelado pela equação de difusão-advectação (MONIN, 1971), de forma que a comunidade científica tem um grande interesse na obtenção de soluções desta equação.

A equação de difusão-advectação tem sido amplamente utilizada em modelos operacionais na determinação do campo de concentração de contaminantes na Camada Limite Atmosférica (CLA). Na literatura, há uma ampla variedade de modelos numéricos, analíticos e híbridos, tais como: método das diferenças finitas (DEBNATH, 2011)(KRISHNAMURTHY; SEN, 1986); método da decomposição de Adomian (ADOMIAN, 1994); método iterativo variacional (GOLBABAI; JAVIDI, 2007); transformada integral (BIAZAR; GHAZVINI, 2009) e método da decomposição por Laplace (KHAN; AUSTIN, 2010).

1.1 Definição do problema

Existe um grande avanço científico em relação a obtenção de soluções analíticas/semi-analíticas da equação de difusão-advectação com derivadas tradicionais (ordem inteira) usando diferentes metodologias. Entretanto, ainda é muito difícil obter-se soluções em forma fechada para fenômenos atmosféricos, os quais tendem a ter alto grau de complexidade nos termos não lineares envolvidos na solução. A equação de difusão-advectação, apesar de ser uma equação linear, é um problema sem solução até os dias de hoje, quando os parâmetros envolvidos dependem simultaneamente de todas as variáveis espaciais e temporárias.

Na literatura ainda há uma lacuna na obtenção de soluções analíticas considerando-se derivadas de ordem inteira e fracionária, aplicadas em problemas de dispersão atmosférica, usando o método da decomposição por Laplace e perturbação por homotopia.

1.2 *Objetivo*

Obter um modelo de dispersão de poluentes na atmosfera utilizando o método da decomposição por Laplace (MDL) (HE, 1999) e perturbação por homotopia, em conjunto do conceito de derivadas fracionárias, na solução da equação de difusão-advecção linear fracionária, estacionária e bidimensional.

1.2.1 *Objetivos específicos*

- a) Obter uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária;
- b) Aplicar uma linguagem de programação para obtenção dos resultados numéricos;
- c) Comparar os resultados encontrados com dados experimentais da literatura.

1.3 *Importância da pesquisa*

A busca de soluções analíticas para os problemas de dispersão é um dos principais objetos de pesquisa na área de modelagem matemática da dispersão de poluentes. Neste contexto, é importante salientar que para situações mais complexas de dispersão de poluentes na atmosfera deve-se recorrer aos modelos numéricos, mas as soluções analíticas são sempre necessárias para uma rápida análise, além de ser fácil de lidar com as variáveis primárias envolvidas no processo de modelagem, servindo como uma excelente ferramenta para a avaliação dos resultados dos modelos numéricos mais sofisticados. Além disso, é possível dizer que, com este procedimento, a solução analítica da equação de advecção-difusão fracionária obtida aqui representa uma poderosa ferramenta para calcular o campo de concentração de poluentes, permitindo uma melhor compreensão do processo de dispersão com menor esforço computacional na análise do modelo (MOREIRA; MORET, 2018).

Normalmente, as equações diferenciais permitem solução com ordens inteiras em suas derivadas. Porém, nas derivadas fracionárias esta ordem pode ser alterada para números não inteiros. A metodologia proposta, juntamente com o conceito de derivadas fracionárias, resulta em uma solução analítica da equação de difusão-advecção linear de forma mais simples e geral, salientando-se que pode ser estendida para problemas não lineares.

Desta forma, a novidade do presente trabalho é a utilização do método de perturbação por homotopia, acoplado com a transformação de Laplace, para resolver a equação de difusão-advecção de ordem inteira e fracionária em problemas atmosféricos.

1.4 Aspectos metodológicos

O método MDL é um método analítico resultante da combinação da transformada de Laplace com o método de perturbação de homotopia (HPM) (HE, 2006), que fornece uma solução exata (ou aproximada) para a equação de difusão-convecção. Todavia, a utilização do conceito de derivadas fracionárias (CAPUTO, 1967) em equações diferenciais ainda permite avaliar melhor o processo de dispersão de poluentes na atmosfera.

O método de perturbação por homotopia foi desenvolvido pelo matemático chinês He (HE, 1999), o qual tem sido empregado para resolver uma grande variedade de problemas lineares e não lineares em várias áreas (GANJI; RAFEI, 2006), (WANG; SI; MO, 2008), (FAZELI; ZAHEDI; TOLOU, 2008), (YILDIRIM; KOÇAK, 2009). Este método introduz um parâmetro de homotopia, onde os valores variam entre 0 e 1, tendo como uma característica marcante que apenas alguns termos de perturbação são suficientes para obter uma solução precisa.

Esta metodologia é uma elegante combinação e pode fornecer uma solução exata (ou aproximada) e de forma simples para uma determinada equação.

1.5 Organização da Dissertação de mestrado

Este documento apresenta 7 capítulos¹ 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 - Modelo matemático:** Ilustra o novo método MDL e o conceito de derivadas fracionárias;
- **Capítulo 5 - Implementação do modelo matemático:** Descreve o modelo matemático e o método de solução da equação de difusão-advecção;
- **Capítulo 6 - Implementação do modelo matemático:** Mostra a implementação do modelo. Nele, descreve-se o experimento utilizado, apresentam-se as parametri-

¹A quantidade de capítulos desta parte depende da profundidade e necessidade dos âmbitos da pesquisa (e.g. o capítulo sobre a revisão da literatura pode ser dividido em subcapítulos: um para cada tema de acordo com o grau de importância).

zações utilizadas e os resultados obtidos, além da análise estatística e gráfica dos resultados;

- **Capítulo 7 - Conclusões** : Mostra-se que o modelo fornece resultados satisfatórios e consegue simular de forma eficiente o fenômeno de dispersão de poluentes na atmosfera, além de mostrar a influência da derivada fracionária na modelagem do problema.

Revisão Bibliográfica

Entre os modelos matemáticos conhecidos que descrevem o problema de dispersão de poluentes na atmosfera, encontram-se os Eulerianos e os Lagrangeanos, os quais diferenciam-se pelo sistema de referência adotado: o modelo Euleriano, considera um sistema de referência fixo no espaço; no modelo Lagrangeano, o sistema de referência segue o movimento da partícula. Vale ressaltar que a metodologia neste trabalho segue o procedimento Euleriano.

Nos modelos Eulerianos, o transporte advectivo e a dispersão de contaminantes na atmosfera são simulados por meio da equação de difusão-advectação (BLACKADAR, 2012), já na forma simplificada, obtida a partir da aplicação da decomposição de Reynolds na equação de conservação de uma espécie genérica C , desprezando a difusão molecular na presença da difusão turbulenta e considerando a teoria de transporte por gradiente 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 c representa a concentração média, u , v , w são as componentes Cartesianas da velocidade do vento, e K_x , K_y , K_z são os coeficientes de difusão turbulenta na direção longitudinal, lateral e vertical respectivamente.

Vários autores obtiveram soluções analíticas para situações simplificadas. Dentre eles, podemos citar Roberts, em 1923, apresentou uma solução bidimensional de concentração de uma fonte tipo linha ao nível do solo considerando a velocidade do vento (U) e o coeficiente de difusão vertical (K_Z) seguindo a lei da potência (ROBERTS, 1923). Rounds, em 1955, obteve uma solução para a equação bidimensional válida para fontes elevadas, considerando a variação exponencial para velocidade do vento e um perfil linear para o coeficiente de difusão (ROUNDS, 1955). Smith, em 1957, resolveu a equação bidimensional de transporte e difusão, com (U) e (K_Z) sendo funções de potências da altura, com os expoentes desta função seguindo a lei conjugada de Schmidt (1-expoente de K_Z) (SMITH, 1957).

Yeh e Huang, em 1975, através dos termos das funções de Green publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com U e K_Z , seguindo os perfis de potências, considerando a atmosfera sem contornos superior ($K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$ em $z \rightarrow \infty$) (YEH; HUANG, 1975).

Demulth, em 1978, através dos termos de Bessel, avançou com a solução, para camada vertical limitada ($K_z \frac{\partial c}{\partial Z} = 0$ em $z = z_i$) (DEMUTH, 1978).

Van Ulder, em 1978, ao aplicar a teoria da similaridade de Monin-Obukhov, para equação de difusão, derivou uma solução para a difusão vertical a partir de fontes contínuas próximas ao solo, com a hipótese de que U e K_Z seguissem os perfis de energia. Seus resultados são semelhantes aos de Roberts, em 1923. Além disso, forneceu um modelo para fontes não superficiais, entretanto aplicável a fontes dentro da camada superficial (ULDEN, 1978).

Nieuwstadt, em 1978, desenvolveu uma solução analítica para a determinação do campo de concentração de contaminantes liberados por fontes tipo área instantânea. As soluções para o campo de concentração são dadas em termos de polinômios de Legendre. O autor obteve os coeficientes de difusão vertical a partir da teoria de similaridade, considerando uma turbulência dominada pelo vento médio:

$$K_z = Gu_*z\left(1 - \frac{z}{z_i}\right) \quad (2.2)$$

onde u_* é a velocidade de fricção e G é uma constante. Mais tarde, Nieuwstadt e Horst, estudaram esta solução através dos termos de polinômios de Jacobi (HORST, 1980)(NIEUWSTADT; ULDEN, 1978).

Sharan, em 1996, apresentou uma solução analítica para a equação de difusão-advecção para condições de ventos fracos em regime permanente. As seguintes hipóteses foram feitas para resolver a equação de difusão-advecção: difusividades turbulentas constantes fonte pontual e velocidade vertical desprezível. A solução da equação foi obtida a partir da aplicação de Transformadas de Fourier (SHARAN *et al.*, 1996).

Moreira, em 1999, propôs uma nova solução analítica da equação de difusão-advecção bidimensional estacionária (MOREIRA; DEGRAZIA; VILHENA, 1999), para a camada limite convectiva (CLC). Nesta solução, é aplicado o método ADMM (*Analytical Dispersion Multilayer Model*). Este método consiste na divisão da camada limite em subcamadas, assim para cada subcamada foi utilizado um coeficiente de difusão médio, permitindo utilizar valores contínuos de coeficientes de difusão e de velocidade do vento fisicamente mais reais.

Catali et al., em 2000, desenvolveram um modelo matemático para uma fonte pontual instantânea usando a técnica da transformada integral generalizada (GITT), que é um método híbrido, o qual combina uma expansão em séries resolvendo um problema de Sturm-Liouville. Este procedimento resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) que, quando solucionado, é invertido para a obtenção da equação original, ressaltando que a solução EDO resultante da aplicação da GITT é feita através de sub-

rotinas numéricas (CATALDI *et al.*, 2000).

Sharan et al., em 2009, apresentaram um modelo analítico para resolver a equação bidimensional de difusão-advecção utilizando a velocidade horizontal do vento ($k_z(x)$) como uma função generalizada da altura vertical acima do solo e da difusividade em função da distância da fonte com finalidade de adequar ao problema da difusão turbulenta (SHARAN; KUMAR, 2009).

Embora o método usado neste trabalho seja anterior as soluções já citadas, as citações da metodologia serão apresentadas a partir deste ponto.

O método de perturbação por homotopia foi desenvolvido pelo matemático chinês He (HE, 1999), o qual tem sido empregado para resolver uma grande variedade de problemas lineares e não lineares em várias áreas (GANJI; RAFEI, 2006), (WANG; SI; MO, 2008), (FAZELI; ZAHEDI; TOLOU, 2008), (YILDIRIM; KOÇAK, 2009), (KHAN; WU, 2011). Este método introduz um parâmetro de homotopia, onde os valores variam entre 0 e 1, tendo como uma característica marcante que apenas alguns termos de perturbação são suficientes para obter-se uma solução precisa. Quando o parâmetro aumenta gradualmente para 1, o sistema passa por uma sequência de deformações e a solução de cada uma está próxima da fase anterior da deformação. Quando o parâmetro for igual a 1, o sistema assume a forma original da equação, e a fase final da deformação dará o resultado desejado.

Litvinenko et al., em 2014, propuseram as primeiras aplicações de derivadas fracionárias para resolução da equação de difusão-advecção. O método aplicado neste equação utiliza a transformada de Fourier para obter uma resolução analítica da equação da fracionada para o transporte de raios cósmicos. A solução descreve a problemática do transporte de partículas energéticas (LITVINENKO; EFFENBERGER, 2014).

Neste outro caso, Goulart et al., em 2017, apresentaram uma alternativa na compreensão do processo de dispersão atmosférica modificando a estrutura matemática da equação advecção-difusão, introduzindo operadores fracionários na equação que regem a distribuição de contaminantes na atmosfera (GOULART *et al.*, 2017). Esta modificação representa de forma mais realista a evolução espacial da concentração de poluentes atmosféricos dispersos em um fluxo turbulento, resultando em uma equação com derivadas fracionárias no termo advecção, dada por:

$$U \frac{C \partial^\alpha c(x, z)}{\partial x^\alpha} = K \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (2.3)$$

onde $0 < \alpha < 1$, C representa a derivada de caputo.

Neste ponto, é importante mencionar que o fenômeno da difusão turbulenta é um dos desafios da ciência moderna, em que o modelo matemático representado pelas equações diferenciais de ordem inteira tradicional não descrevem adequadamente o problema da difusão turbulenta. Ou seja, nos modelos tradicionais de dispersão de poluentes, os parâmetros U e K são geralmente considerados funções de variáveis x e z , para lidar com a difusão anômala introduzida pela turbulência. Em particular, o efeito de memória, importante em regiões próximas de fontes contínuas altas e baixas, foi introduzido em muitos trabalhos através da difusividade vertical turbulenta (SHARAN; MODANI, 2006), (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001), (MOREIRA *et al.*, 2014). Ao contrário do usual, neste trabalho o efeito de memória foi introduzido através da derivada fracionária.

Neste trabalho, devido à modificação da estrutura matemática da equação tradicional de advecção-difusão (GOULART *et al.*, 2017), propõe-se um avanço na compreensão do processo de dispersão de poluentes atmosféricos com a obtenção de uma nova solução analítica através da utilização do método de perturbação por homotopia, acoplado com a transformação de Laplace, que agora será representada pela equação de advecção-difusão fracionária em problemas atmosféricos. Apesar da aparente "pequena modificação" na equação com a introdução da derivada fracionada representada pelo parâmetro, este termo representa um passo importante no modelamento do processo de dispersão anômala de poluentes atmosféricos.

Camada Limite Planetária (CLP)

Para realizar a modelagem matemática da dispersão de poluentes na atmosfera, se faz necessário um estudo da física envolvida no problema, onde ocorre o processo de dispersão. Neste sentido, o capítulo traz uma abordagem sobre camada limite planetária e os seus principais conceitos.

A atmosfera da terra é uma camada de ar constituída de gases, vapor de água e particulado que envolve o planeta. A mesma está dividida em Troposfera, Estratosfera, Mesosfera e Termosfera.

Troposfera é a camada mais próxima da superfície terrestre. Sua profundidade varia entre 9 a 16 km. É nela onde estão os fenômenos de interesse para a meteorologia.

3.1 Camada Limite Planetária

Também conhecida como camada limite atmosférica (CLA) ou camada limite. É definida como a porção da atmosfera diretamente influenciada pela presença da superfície (STULL, 2012).

A altura da CLP estende-se 100-3000m (GARRATT, 1994), dependendo das modificações ocorridas na superfície terrestre, dos níveis de insolação diários e da hora do dia. Acima da CLP, o gradiente de pressão e a força de Coriolis estão em balanço. Esta região é conhecida como atmosfera livre (figura 3.1).

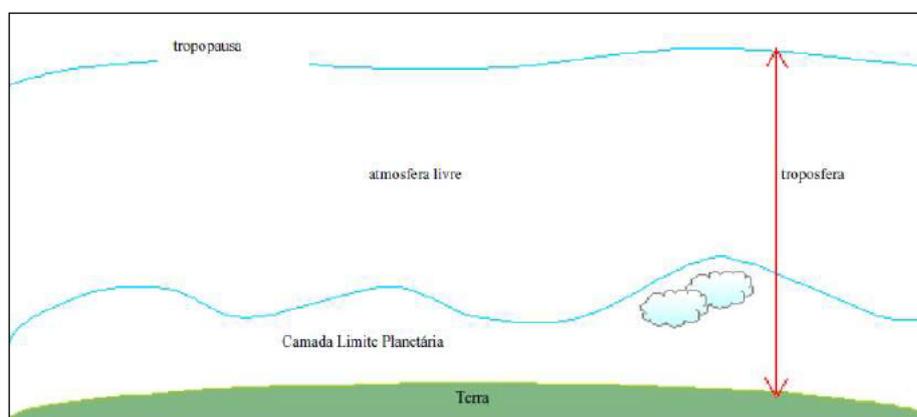


Figura 3.1: Divisão da troposfera. Fonte Stull, 2012. Figura adaptada

Esta camada sofre influência da evaporação, transpiração, emissão de poluentes, transferência de calor sensível e latente, e responde às forças de atrito viscoso.

O escoamento de ar na CLP pode ser dividido em três categorias: vento médio, turbulência e ondas. Cada um pode existir separadamente ou na presença de qualquer um dos outros.

O vento médio é responsável pelo transporte na horizontal (advecção), onde a rugosidade da superfície da terra influencia na velocidade do vento, assumindo valores menores junto à superfície.

As ondas transportam calor, umidade e outros escalares como poluentes, mas são efetivas para transporte de *momentum* e energia. Elas podem ser geradas, localmente, pelo cisalhamento do vento médio e pelo escoamento médio sobre obstáculos. São mais frequentes na CLP noturna.

A turbulência ocorre geralmente próximo a superfície da terra e esta é uma das características da CLP que a torna diferente do restante da atmosfera. Ela é gerada pelas forças térmicas (aquecimento solar) e mecânica (cisalhamento próximo a superfície).

A CLP está subdividida de acordo com os processos físicos envolvidos (turbulência mecânica e/ou convectiva), em camada limite convectiva, camada residual noturna e camada limite estável (figura 3.2).

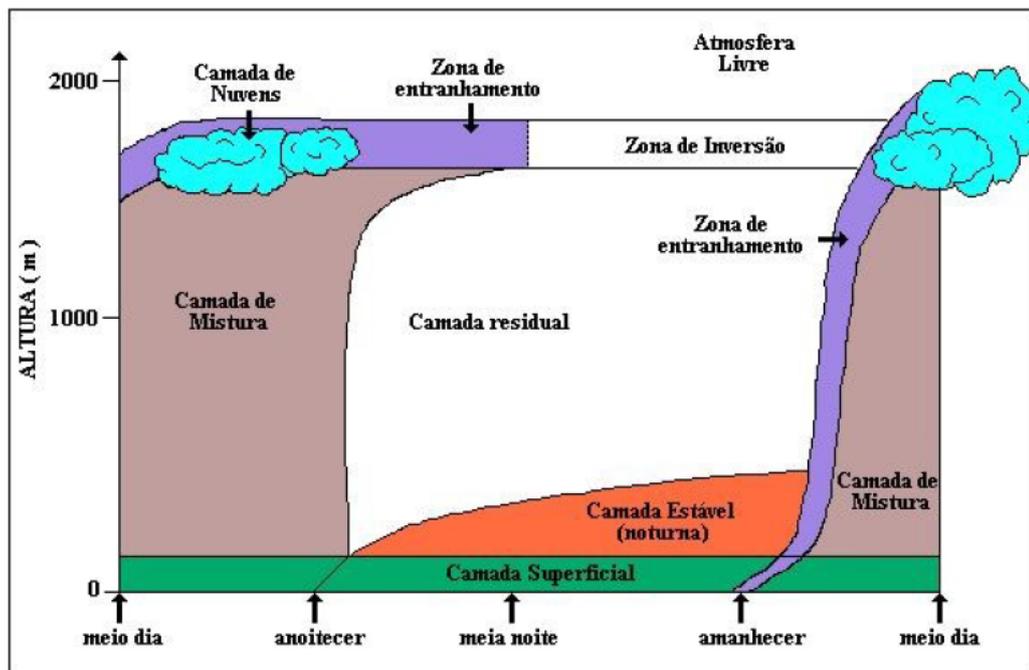


Figura 3.2: Evolução temporal da CLP. Fonte Stull, 2012

3.2 Camada Limite Convectiva

A camada limite convectiva (CLC) ou condição instável é gerada pelo aquecimento diurno da superfície alcança altura de 100-2000m a partir do solo.

Esta camada começa a se formar depois do nascer do sol, quando o solo começa a aquecer, o qual por condução aquece o ar em contado com ele. Este ar aquecido é mais leve que o ar adjacente (mais frio) e tende a subir, enquanto o ar mais frio tende a descer (fluxo de calor positivo) iniciando a convecção térmica.

Como a maioria das fontes poluidoras está próxima da superfície, a concentração de poluentes pode aumentar consideravelmente na CLC, pois estes poluentes estão sendo transportados por turbilhões e pelas termas (massa de ar quente que se eleva a partir do solo). Durante o decorrer do dia, as termas vão alcançando alturas mais elevadas.

A CLP é definida como a região da atmosfera que se inicia do solo ($z = 0$) até onde o fluxo de calor se torna negativo ($z = z_i$). Nesta região a taxa de variação da temperatura potencial é negativa, ou seja, a temperatura potencial diminui com a altura. Nesta região a turbulência é intensificada. Quando $z = z_i$ a temperatura potencial começa a aumentar.

A CLP pode ser subdividida em quatro camadas: Camada superficial, Camada de convecção livre, Camada de mistura e Camada interfacial de estranhamento.

3.2.1 Camada Superficial (CS)

A camada superficial apresenta grande variação de temperatura e velocidade e o fluxo turbulento é aproximadamente constante, na qual predomina a turbulência mecânica (cisalhamento do vento). Está restrita a alturas menores do que $Z \leq [L_{MO}]$, onde L_{MO} é o comprimento de Monin- Obukhov, definido por:

$$L_{MO} = \frac{u_*^3}{k \frac{g}{\theta} (\overline{w\theta})_0} \quad (3.1)$$

Onde θ é a temperatura pontencial média, $(\overline{w\theta})_0$ é o fluxo de calor turbulento na superfície, u_* é a velocidade de fricção na superfície, k é a constante de Von Kármán e g é a aceleração da gravidade.

Segundo Panovsky et al. uma CLC é considerada bem desenvolvida quando $[L_{MO}]$ apre-

senta valores típicos entre 10 e 100m, de modo que $z_i/[L_{MO}] \geq 10$. Logo essa razão pode ser considerada uma parâmetro de estabilidade ([PANOFSKY; DUTTON, 1984](#)).

- Convecção fraca: $z_i/[L_{MO}] < 5$;
- Convecção moderada: $5 < z_i/[L_{MO}] < 10$;
- Convecção alta: $z_i/[L_{MO}] > 10$;

3.2.2 Camada de Convecção Livre (CCL)

A camada de convecção livre é a zona de transição entre a Camada superficial e a Camada de mistura. A CLC está entre $[L_{MO}] < Z < 0.1Z_I$, nesta camada a velocidade, não é importante, mas a escala z ainda é. De fato, nunca chega à zero na prática, mas a condição de convecção livre local determina a escala da estrutura da turbulência ([WILLIAMS; HACKER, 1993](#)).

3.2.3 Camada de Mistura (CM)

Considerada a maior camada da CLC, a camada de mistura está localizada na região entre $[L_{MO}] < Z < Z_I$, e tem este nome devido a intensa mistura vertical que tende a conservar as variáveis como: temperatura potencial, umidade, velocidade do vento e a turbulência. Diante disso os parâmetros mais importantes para a descrição desta camada são Z_I e a escala convectiva w_* ([WILLIS; DEARDORFF, 1976](#)), que é dada por:

$$L_{MO} = w_* = \left(\frac{g}{\theta} (\overline{w\theta}) z_i \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.2)$$

As dimensões dos turbilhões convectivos são expressas em função de Z_I e as velocidades turbulentas são proporcionais a w_* . Valores típicos de Z_I e w_* são, respectivamente, 1000 m a 2000 m e 2m/s ([WEIL; BROWER, 1984](#)).

A escala de tempo convectiva (z_i/w_*) é da ordem de 10 a 20 minutos em muitos casos. Este período é o tempo para o ar circular entre a superfície e o topo da CM. Diante disso, mudanças nas forçantes superficiais podem comunicar com o resto da CM em um curto espaço de tempo.

3.2.4 *Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE)*

A camada está localizada no topo da CLP, entre a CM e a atmosfera livre. A zona de entranhamento é a região de ar estaticamente estável no topo da camada de mistura, onde existe entranhamento de ar da atmosfera livre para baixo e penetração convectiva das plumas térmicas para cima. Esta zona é caracterizada pela inversão térmica e por limitar os movimentos da CM.

3.3 *Camada Residual (CR)*

Na CR ocorre o início do processo de decaimento dos grandes turbilhões que formam a CLC. Isto acontece por volta de meia hora antes do pôr-do-sol. Nesta camada a turbulência é um resíduo daquela gerada por convecção durante o dia, e sua intensidade é praticamente igual em todas as direções. Resultando que as plumas de fumaça emitidas dentro da CR tendem a se dispersar de forma homogênea.

3.4 *Camada Limite Estável (CLE)*

A camada limite estável ou noturna (CN) surge antes do pôr-do-sol, e é gerada pelo resfriamento noturno da superfície. Este resfriamento provoca um fluxo de calor negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões. Portanto os poluentes emitidos na CLE se dispersam lentamente na vertical e mais rapidamente na horizontal e possui uma turbulência fraca. Esta camada alcança altura de 100-300m e é formada por pequenos turbilhões.

3.5 *Generalidades da dispersão na CLP*

Na camada limite convectiva há uma condição de instabilidade atmosférica como já mencionado anteriormente. Esta instabilidade tem origem devido a movimentação do fluxo de ar quente ascendente (updrafts) e do fluxo de ar frio descendente (downdraft), provocado pela incidência de raios solares com aquecimento do solo. Nesta situação tem-se a condição superadiabática. Os poluentes emitidos na CLC exibirão uma característica de *looping* (figura (3.3)). Resultando em uma distribuição uniforme dos poluentes, independente da altura da emissão.

Em condições de neutralidade da CLP, presente na camada limite residual, a pluma tende a dissipar na mesma proporção em ambas direções (horizontal e vertical), fato da turbulência existente ser aproximadamente igual em todas as direções. Os poluentes emitidos na CR exibirão uma característica de *Conning* (figura (3.4)).

Em condições de atmosfera estável, característica da CLE, que ocorre devido à baixa difusão atmosférica, pois durante condições estáveis a intensidade da turbulência é consideravelmente reduzida. Nesta condição os poluentes emitidos sofrem dispersão somente pela ação do vento médio na horizontal exibindo uma característica de *fannping* (figura (3.5)).

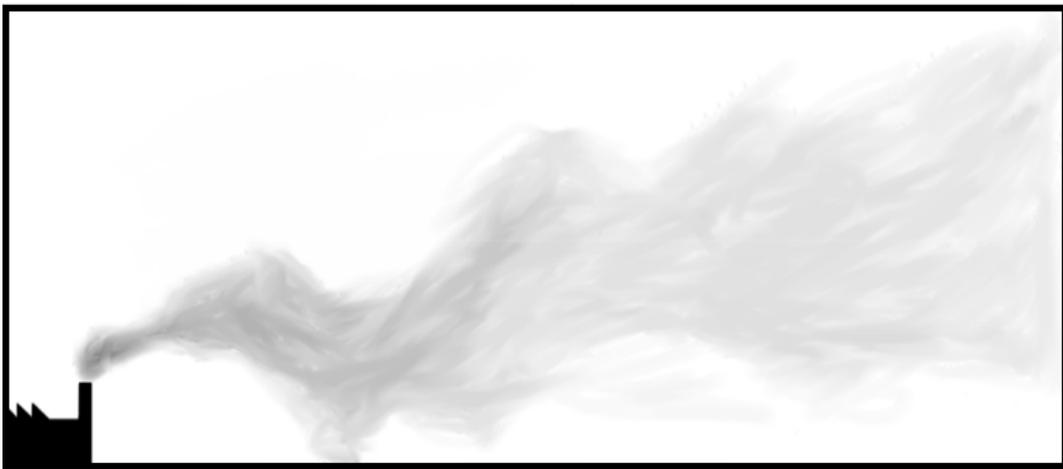


Figura 3.3: Comportamento da pluma dispersada na CLC



Figura 3.4: Comportamento da pluma dispersada na CR

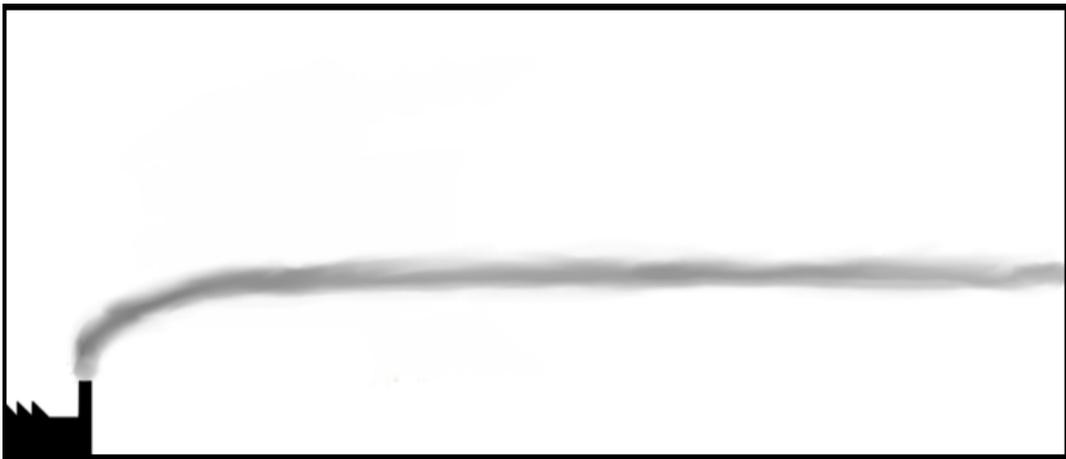


Figura 3.5: Comportamento da pluma dispersada na CLE

Modelo matemático

Este trabalho utiliza o método MDL e o conceito de derivadas fracionárias aplicados em problemas de dispersão de poluentes na CLP.

4.1 Derivada Fracionária - Definição de Caputo

Existem várias definições de derivados de ordem fracionada. Estas definições incluem o Riemann-Liouville, Caputo, Riesz, Weyl, Grunwald-Letnikov (OLDHAM; SPANIER, 1974)(DIETHELM, 2010).

Neste trabalho utilizou-se a definição de Caputo, pois ela incorpora as condições iniciais da função, o que a torna fundamental para resolver problemas de dispersão de poluentes na CLP.

Segundo Caputo a derivada de ordem fracionária é dada por:

$$D_*^\alpha = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t \frac{f^n(s)ds}{(t-s)^{\alpha+1-n}}, & n-1 < \alpha < n \\ \frac{d^n}{dt^n} f(t), & \alpha = 1 \end{cases} \quad (4.1)$$

Onde $\alpha > 0$, n é o menor inteiro maior que α .

4.1.1 Função de Mittag-Leffler

Dentre as funções relacionadas com o cálculo fracionário, uma das mais importantes é a função de Mittag-Leffler que representa uma generalização para a função exponencial e tem papel fundamental no estudo de equações diferenciais de ordem não-inteira (PRABHAKAR *et al.*, 1971).

A função de Mittag-Leffler de um parâmetro, com $x \in \Re$ e $x > 0$ e dada por:

$$E_\alpha(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \quad (4.2)$$

Note que, no caso em que $\alpha = 1$, essa função pode ser descrita da seguinte forma:

$$E_1(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = e^x \quad (4.3)$$

A função de Mittag-Leffler de dois parâmetros, com $x \in \mathfrak{R}$ e $x > 0$ e dada por:

$$E_{\alpha,\beta}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \quad (4.4)$$

4.1.2 Transformada de Laplace da derivada de Caputo

A transformada de Laplace aplicada na derivada de Caputo necessita de condições iniciais da função, sendo essencial o conhecimento de suas derivadas de ordem inteira, que são fisicamente interpretáveis (CAPUTO, 1967).

Considerando $\alpha > 0$, n é o menor inteiro maior que α , a transformada de Laplace de ordem não inteira e dada por:

$$\begin{aligned} L[D^\alpha f(t)] &= s^{\alpha-n} \left[s^n F(S) - \sum_{j=1}^n s^{n-j} f^{(j-1)}(0) \right] \\ &= s^\alpha F(S) - \sum_{j=1}^n s^{\alpha-j} f^{(j-1)}(0) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Para $0 < \alpha < 1$, a Eq.(4.15) pode ser reescrita como:

$$L[D^\alpha f(t)] = s^\alpha F(S) - s^{\alpha-1} f(0) \quad (4.6)$$

4.2 Método da Decomposição por Laplace (MDL)

4.2.1 Equação Diferencial Parcial de ordem inteira

Para demonstrar a ideia básica do método considera-se uma equação diferencial parcial (EDP) não-linear e não-homogênea, na seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} + Ry(x, t) + Ny(x, t) = f(x, t) \quad (4.7)$$

com as condições iniciais dadas por:

$$y(x, 0) = \alpha(x) \quad (4.8a)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t}(x, 0) = \beta(x) \quad (4.8b)$$

onde R é um operador diferencial linear, N representa um operador diferencial não-linear e $f(x, t)$ é o termo fonte. Aplicando-se a transformada de Laplace (denotada por L) na variável t em ambos os lados da Eq.(4.1) tem-se,

$$L\left[\frac{\partial^2 Y(x, t)}{\partial t^2}\right] + L[Ry(x, t)] + L[Ny(x, t)] = L[f(x, t)] \quad (4.9)$$

resultando,

$$s^2 L[Y(X, T)] - sy(x, 0) - \frac{\partial y}{\partial t}(x, 0) = -L[Ry(x, t)] - L[Ny(x, t)] + L[f(x, t)] \quad (4.10)$$

Assim, aplicando-se as condições dadas e a inversa da transformada de Laplace, obtém-se:

$$y(x, t) = F(x, t) - L^{-1}\left[\frac{1}{s^2}(L[Ry(x, t)] + L[Ny(x, t)]) + \frac{1}{s^2}(L[f(x, t)])\right] \quad (4.11)$$

onde $F(x, t)$ representa as condições iniciais prescritas:

Agora, aplicando-se o método de perturbação por homotopia:

$$y(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) \quad (4.12)$$

sendo que os termos não lineares podem ser decompostos como,

$$Ny(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} p^n H_n(y) \quad (4.13)$$

onde os termos H_n são os polinômios de He. Logo, colocando-se as Eqs.(3.6) e (3.7) em (4.5) resulta,

$$\sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) = F(x, t) - p(L^{-1}[\frac{1}{s^2}L[R\sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) R\sum_{n=0}^{\infty} p^n H_n(x, t)]]]) \quad (4.14)$$

Finalmente, comparando-se os termos com potências de p surgem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} p^0 : y_0(x, t) &= F(x, t) \\ p^1 : y_1(x, t) &= (L^{-1}[\frac{1}{s^2}L[Ry_0(x, t) + H_0(y)]]) \\ p^2 : y_2(x, t) &= (L^{-1}[\frac{1}{s^2}L[Ry_1(x, t) + H_1(y)]]) \\ p^3 : y_3(x, t) &= (L^{-1}[\frac{1}{s^2}L[Ry_2(x, t) + H_2(y)]]) \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde os polinômios de He (HE, 2006) são definidos como:

$$H_n(y_0, \dots, y_n) = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial p^n} N \left(\sum_{k=0}^n p^k y_k \right)_{p=0} \quad (4.16)$$

4.2.2 Equação Diferencial Parcial de ordem fracionária

Para demonstrar a ideia básica do método considera-se uma EDP linear fracionária com condição inicial na seguinte forma:

$$\frac{\partial^\alpha y(x, t)}{\partial t^\alpha} + Ry(x, t) + Ny(x, t) = 0 \quad (4.17)$$

com a condição inicial dada por:

$$y(x, 0) = \beta(x) \quad (4.18)$$

para $0 < \alpha \leq 1$, onde R é o operador diferencial linear, N é um operador não-linear e α é um parâmetro fracionário. Aplicando-se a transformada de Laplace (denotada por L) aplicando a definição de Caputo, em ambos os lados da Eq. (4.17) na variável t , resulta:

$$S^\alpha Y(x, s) - S^{\alpha-1}y(x, 0) = -L [Ry(x, t)] - L [Ny(x, t)] \quad (4.19)$$

Assim, aplicando-se as condições dadas e a transformada de Laplace inversa L^{-1} , obtém-se:

$$y(x, t) = y(x, 0) - L^{-1} \left[\frac{1}{s^\alpha} L [Ry(x, t)] + \frac{1}{s^\alpha} L [Ny(x, t)] \right] \quad (4.20)$$

De acordo com o método de perturbação por homotopia padrão, a solução Y pode ser expandida em uma série infinita Eq.(4.12) e os termos não lineares pela Eq.(4.13). Logo, substituindo-se as Eq. (4.19) e Eq. (4.20) na Eq. (4.17), resulta:

$$\sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) = y(x, 0) - p \left(L^{-1} \left[\frac{1}{s^\alpha} L \left[R \sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) \right] + \frac{1}{s^\alpha} L \left[R \sum_{n=0}^{\infty} p^n H_n(y) \right] \right] \right) \quad (4.21)$$

Finalmente, comparando-se os termos com potências de p idênticos surgem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} p^0 : y_0(x, t) &= \beta(x) \\ p^1 : y_1(x, t) &= -L^{-1} \left[\frac{1}{s^\alpha} L \left[Ry_0(x, t) + \frac{1}{s^\alpha} H_0(y) \right] \right] \\ p^2 : y_2(x, t) &= -L^{-1} \left[\frac{1}{s^\alpha} L \left[Ry_1(x, t) + \frac{1}{s^\alpha} H_1(y) \right] \right] \\ p^3 : y_3(x, t) &= -L^{-1} \left[\frac{1}{s^\alpha} L \left[Ry_2(x, t) + \frac{1}{s^\alpha} H_2(y) \right] \right] \\ &\vdots \\ p^n : y_n(x, t) &= -L^{-1} \left[\frac{1}{s^\alpha} L \left[Ry_{n-1}(x, t) + \frac{1}{s^\alpha} H_{n-1}(y) \right] \right] \end{aligned} \quad (4.22)$$

Implementação do modelo matemático

Material disperso na atmosfera se dispersam pela difusão turbulenta causada pela variação de temperatura na CLP, fazendo com que os gases se desloquem na CLP por meio da advecção na horizontal e pela turbulência na vertical.

O estudo de transporte e dispersão de poluentes na CLP podem ser descrito pela equação de difusão-advecção expressa por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S \quad (5.1)$$

onde c representa a concentração média, e u , v , w são as componentes cartesianas da velocidade do vento, respectivamente, e S é o termo fonte. Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$, $\overline{w'c'}$, representam os fluxos turbulentos de poluentes na direção longitudinal, lateral e vertical, respectivamente.

Baseando-se na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão molecular assume que a turbulência é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média para resolver o problema de fechamento da Eq.(5.1), proposta pela teoria K, tem-se:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial C}{\partial x}; \quad \overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial C}{\partial y}; \quad \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (5.2)$$

Neste sentido, considerando-se um sistema Cartesiano de coordenadas em que a direção x coincide com a do vento médio, a equação de difusão-advecção transiente pode ser escrita como (BLACKADAR, 2012):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S \quad (5.3)$$

onde K_x , K_y , K_z são os coeficientes de difusão turbulenta na direção longitudinal, lateral e vertical respectivamente.

5.1 A equação de difusão-advecção 2D estacionária

O modelo proposto neste trabalho, trata-se da dispersão de gases poluentes na atmosfera, liberados por uma fonte pontual, utilizando a equação de difusão-advecção (EDA) Eq.(5.3).

Adotando o sistema de referência onde x é a direção do vento médio U , y é a direção perpendicular ao vento médio e z é a altura (onde zero é o nível do solo) (Figura (5.1)).

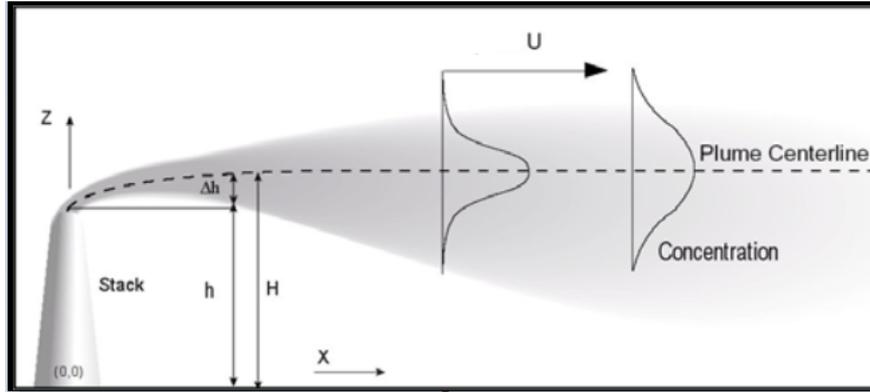


Figura 5.1: Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes

Desprezando-se a difusão longitudinal devido ao termo de transporte em x ser muito maior que o difusivo ($(u \frac{\partial c}{\partial x} \gg \frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial C}{\partial x}))$), assim como a advecção lateral ($v \frac{\partial c}{\partial y}$) e vertical ($w \frac{\partial c}{\partial z}$) que são muito menores que o termo advectivo longitudinal. Dessa forma a Eq.(5.3) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} = + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S \quad (5.4)$$

Integrando a Eq.(5.4) na direção y da forma:

$$c(x, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{C}(x, y, z, t) dy \quad (5.5)$$

Com isso o termo de difusão na direção y é zero, assim temos a equação bidimensional transiente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) + S \quad (5.6)$$

Adotando-se para este modelo o regime estacionário ($\frac{\partial c}{\partial t} = 0$) e termo fonte ($S = 0$). Dessa forma a Eq.(5.6) pode ser reescrita como:

$$U \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) \quad (5.7)$$

Neste momento, mostra-se como obter a solução da equação de difusão-advecção (ED) considerando-se a metodologia descrita anteriormente para três situações distintas: com coeficiente de difusão constante e derivada de ordem inteira, com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte e ordem inteira e, finalmente, equação fracionária com coeficiente de difusão constante. Em todas as situações o vento médio U é considerado constante, pois os dados experimentais usados para confronto com os modelos fornecem esta informação. Portanto, a parametrização neste trabalho, por simplicidade, é somente do coeficiente de difusão K . Embora os coeficientes usados neste trabalho sejam constantes a metodologia pode ser usada para coeficientes variáveis na direção vertical.

5.2 Equação de difusão-advecção com coeficiente de difusão constante

Neste primeiro caso considera-se o coeficiente de difusão vertical constante. Logo, a Eq.(5.7) pode ser reescrita como:

$$U \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (5.8)$$

para $0 < z < z_i$ e $x > 0$, onde z_i é a altura da CLP. Para solução da Eq.(5.8) necessita-se determinar as condições de contorno. Desta forma, tem-se a condição de fluxo nulo de poluentes no topo do domínio vertical e na superfície:

$$K \frac{\partial c}{\partial z} = 0, \quad em \ z = z_i \quad (5.9a)$$

$$K \frac{\partial c}{\partial z} = 0, \quad em \ z = z_0 \quad (5.9b)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade. Além disto, assume-se a condição de uma fonte de emissão constante Q :

$$c(0, z) = \frac{Q}{U} \delta(z - H_s), \text{ em } x = 0 \quad (5.10)$$

onde $\delta(z - H_s)$ é a função delta de Dirac e H_s é a altura da fonte. Neste trabalho, aproxima-se a função delta de Dirac pela seguinte expressão:

$$\delta(z - H_s) = \frac{1}{z_i} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.11)$$

sendo os autovalores dados por:

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{z_i}, \text{ em } n = 1, 2, 3, \dots$$

Aplicando-se a transformada de Laplace na Eq.(5.8), na variável x , obtém-se:

$$U [s\hat{c}(s, z) - c(0, z)] = L \left[K \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] = kL \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \quad (5.12)$$

Rearranjando a Eq.(5.12), obtém-se:

$$\hat{c}(s, z) = \frac{c(0, z)}{s} + \frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \quad (5.13)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Eq.(5.13):

$$L^{-1} [\hat{c}(s, z)] = L^{-1} \left[\frac{c(0, z)}{s} \right] + L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.14)$$

Logo,

$$c(x, z) = c_0 + L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.15)$$

onde c_0 é dado pela Eq.(5.11), assim escrevendo os quatro primeiros termos, obtém-se:

$$c_0 = \frac{1}{z_i} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.16)$$

$$c_1 = L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.17)$$

$$c_2 = L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.18)$$

$$c_3 = L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.19)$$

De forma que é possível escrever na forma genérica os demais termos da solução em série:

$$c_n = L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_{n-1}}{\partial z^2} \right] \right] \text{ em } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.20)$$

Com a seguinte solução geral:

$$c(x, z) = c_0 + c_1 + c_3 + \dots c_n \quad (5.21)$$

Portanto, para obtenção do termo c_1 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_0}{\partial z} &= -\frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \\ \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} &= -\frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.22)$$

Logo,

$$\begin{aligned} c_1 &= L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{s^2 U} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] = \\ &= -\frac{Kx}{U} \frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.23)$$

Repetindo a mesma analogia para o c_2 e c_1 , tem-se

$$c_2 = L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{s^3 U} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = \frac{K^2 x^2}{2U^2} \frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.24)$$

$$c_3 = L^{-1} \left[\frac{K}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{s^4 U} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = -\frac{K^3 x^3}{6U^3} \frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^6 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.25)$$

Portanto, agrupando-se estes primeiros termos,

$$c(x, z) = \frac{Q}{U z_i} + \frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \cdot \left\{ 1 - \frac{Kx}{U} \lambda_n^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{Kx}{U} \right)^2 \lambda_n^4 - \frac{1}{6} \left(\frac{Kx}{U} \right)^3 \lambda_n^6 + \dots \right\} \quad (5.26)$$

De forma que a solução final é dada por:

$$c(x, z) = \frac{Q}{Uh} + \frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) e^{-\frac{Kx}{U} \lambda_n^2} \quad (5.27)$$

a qual é a bem conhecida solução Gaussiana.

5.3 Equação de difusão-advecção com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte

Nesta segunda análise considera-se que o coeficiente de difusão vertical depende somente da distância longitudinal da fonte, assim a partir da Eq.(5.7), tem-se:

$$U \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} = K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (5.28)$$

onde

$$K_z(x) = \varepsilon f(x) \quad (5.29)$$

Assim, para obtenção da solução da Eq.(5.28) é possível fazer uma mudança de variável da seguinte forma:

$$x^* = \int_0^{x'} f(x') dx' \quad (5.30)$$

onde x^* mantém sua dimensão original $[L]$ e ε é a parte dimensional do coeficiente de difusão $[L^2/T]$. Logo, a Eq.(5.28) pode ser reescrita:

$$U \frac{\partial c(x, z)}{\partial x^*} = \varepsilon \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (5.31)$$

Para solução da Eq.(5.28), necessita-se determinar as condições de contorno. Desta forma, tem-se a condição de fluxo nulo de contaminantes na superfície e no topo do domínio vertical Eq. (5.9a) e Eq. (5.9b). Com taxa de emissão Q na altura da fonte dada pela Eq.(5.11).

Aplica-se a transformada de Laplace na Eq.(5.28), na variável x , juntamente com sua inversa, obtém-se:

$$U [s\hat{c}(s, z) - c(0, z)] = L \left[\varepsilon \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] = \varepsilon L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \quad (5.32)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Eq. (5.32)

$$L^{-1} [\hat{c}(s, z)] = L^{-1} \left[\frac{c(0, z)}{s} \right] + L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.33)$$

Com isso,

$$c(x, z) = c_0 + L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.34)$$

onde c_0 é dado pela Eq.(5.11), Logo, para obtenção dos demais termos da solução em série, tem-se a seguinte equação genérica:

$$c_n = {}^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_{n-1}}{\partial z^2} \right] \right] \text{ em } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.35)$$

Com a seguinte solução geral:

$$c(x, z) = c_0 + c_1 + c_3 + \dots c_n \quad (5.36)$$

Assim, para obtenção do termo c_1 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_0}{\partial z} &= -\frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \\ \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} &= -\frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.37)$$

Logo,

$$\begin{aligned} c_1 &= L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{s^2 U} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] = \\ &= -\frac{\varepsilon x^*}{U} \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.38)$$

Por analogia para o c_2 e c_3 , tem-se

$$\begin{aligned} c_2 &= L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{s^3 U} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = \\ &= \frac{\varepsilon^2 x^{*2}}{2U^2} \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.39)$$

$$c_3 = L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{sU} L \left[\frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{\varepsilon}{s^4 U} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] =$$

$$- \frac{\varepsilon^3 x^{*3}}{6U^3} \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^6 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.40)$$

Portanto, agrupando-se estes primeiros termos,

$$c(x, z) = \frac{Q}{Uz_i} + \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \cdot$$

$$\left\{ 1 - \frac{\varepsilon x^*}{U} \lambda_n^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon x^*}{U} \right)^2 \lambda_n^4 - \frac{1}{6} \left(\frac{\varepsilon x^*}{U} \right)^3 \lambda_n^6 + \dots \right\} \quad (5.41)$$

De forma que a solução final é dada por:

$$c(x, z) = \frac{Q}{Uz_i} + \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) e^{-\frac{\varepsilon x^*}{U} \lambda_n^2} \quad (5.42)$$

Finalmente, substituindo-se a variável x^* na Eq.(5.30), obtém-se a solução final:

$$c(x, z) = \frac{Q}{Uz_i} + \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) e^{\left(\frac{\lambda_n^2}{U} \int_0^{x'} f(x') dx' \right)} \quad (5.43)$$

5.4 Equação de difusão-advecção fracionária com coeficiente de difusão constante

A modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera pode ser dada pela equação de difusão-advecção bidimensional fracionária dada por :

$$U \frac{\partial^\alpha c(x, z)}{\partial x^\alpha} = K_z(z) \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (5.44)$$

para $0 < \alpha \leq 1$, é o termo de ordem fracionária, U representa o perfil vertical da

velocidade média do vento na direção longitudinal (eixo x) e K_z é o perfil vertical do coeficiente de difusão vertical (eixo z). Por simplicidade, sem perda de generalidade, considera-se U e k constantes:

$$U \frac{\partial^\alpha c(x, z)}{\partial x^\alpha} = K \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (5.45)$$

para $0 < z < z_i$ e $x > 0$. Para solução da Eq.(5.45) necessita-se determinar as condições de contorno. Desta forma, tem-se a condição de fluxo nulo de contaminantes no topo do domínio vertical e na superfície Eq. (5.9a) e Eq. (5.9b). Com taxa de emissão Q na altura da fonte dada pela Eq.(5.11).

Agora é possível usar a metodologia MDL. Aplicando-se a transformada de Laplace na Eq. (5.45) utilizando a definição Caputo Eq.(4.6), na variável x , obtém-se:

Aplicando-se a transformada de Laplace na Eq.(5.45), na variável x , obtém-se:

$$U [s^\alpha \hat{c}(s, z) - s^{\alpha-1} c(0, z)] = L \left[K \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] = kL \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \quad (5.46)$$

onde \hat{c} representa a concentração transformada. Rearranjando-se a equação anterior, obtém-se:

$$\hat{c}(s, z) = \frac{c(0, z)}{s} + \frac{K}{s^\alpha U} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \quad (5.47)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Eq. (5.47)

$$L^{-1} [\hat{c}(s, z)] = L^{-1} \left[\frac{c(0, z)}{s} \right] + L^{-1} \left[\frac{K}{U s^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.48)$$

Logo,

$$c(x, z) = c_0 + L^{-1} \left[\frac{K}{U s^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (5.49)$$

onde c_0 é dado pela Eq.(5.11), Logo, para obtenção dos demais termos da solução em

série, tem-se a seguinte equação genérica:

$$c_n = {}^{-1} \left[\frac{K}{U s^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_{n-1}}{\partial z^2} \right] \right] \text{ em } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.50)$$

Com a seguinte solução geral:

$$c(x, z) = c_0 + c_1 + c_3 + \dots c_n \quad (5.51)$$

Assim, para obtenção do termo c_1 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_0}{\partial z} &= -\frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \\ \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} &= -\frac{2Q}{U z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.52)$$

Logo,

$$\begin{aligned} c_1 &= L^{-1} \left[\frac{K}{U s^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{U S^{\alpha+1}} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] = \\ &= -\frac{K}{U} \frac{2Q}{U z_i} \frac{x^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.53)$$

Por analogia para o c_2 e c_3 , tem-se

$$\begin{aligned} c_2 &= L^{-1} \left[\frac{K}{U s^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{U S^{2\alpha+1}} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = \\ &= \frac{K^2}{U^2} \frac{2Q}{U z_i} \frac{x^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.54)$$

$$\begin{aligned} c_3 &= L^{-1} \left[\frac{K}{U s^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{U S^{3\alpha+1}} L \left[\frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} \right] \right] = \\ &= -\frac{K^3}{U^3} \frac{2Q}{U z_i} \frac{x^{3\alpha}}{\Gamma(3\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \end{aligned} \quad (5.55)$$

Portanto, agrupando-se estes primeiros termos resulta,

$$c(x, z) = \frac{Q}{Uz_i} + \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \cdot \left\{ 1 - \frac{K}{U} \lambda_n^2 \frac{x^\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)} + \frac{K}{U} \lambda_n^4 \frac{x^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha + 1)} - \frac{K}{U} \lambda_n^6 \frac{x^{3\alpha}}{\Gamma(3\alpha + 1)} + \dots \right\} \quad (5.56)$$

De forma que a solução é dada por:

$$c(x, z) \frac{Q}{Uz_i} + \frac{2Q}{Uz_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_\alpha \left(-\frac{\lambda_n^2 K}{U} x^\alpha \right) \quad (5.57)$$

onde E_α é a função de Mittag-Leffler Eq.(4.4), a qual é intrínseca a solução de problemas com derivadas fracionárias.

Esta equação é a mesma encontrada no trabalho de (GOULART *et al.*, 2017), porém obtida de forma muito mais simples e direta. Observa-se prontamente que a Eq.(5.45) retorna a Eq.(5.8) se $\alpha = 1$, de forma que é uma solução mais geral.

5.5 Parametrização da turbulência

A presença de turbulência é a principal característica da CLP, pois é responsável pela alta capacidade difusiva. Esta característica é representada pelos coeficientes de difusão. A escolha adequada de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para complementar a modelagem do transporte de poluentes na atmosfera.

A parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no sentido que os modelos matemáticos recebem uma relação aproximada que substitui um termo desconhecido.

Neste trabalho, utilizam-se três coeficientes de difusão turbulenta válidos na CLC, sendo representados pelas Eq.(5.58), (5.59) e (5.60).

1. Coeficiente de difusão turbulento dependente somente da variável z foi deduzido por Degrazia para condições instáveis (DEGRAZIA; VELHO; CARVALHO, 1997), sendo este:

$$K_z = 0.22w_*z_i \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{\left(-4\frac{z}{z_i}\right)} - 0.0003e^{\left(\frac{8z}{z_i}\right)}\right] \quad (5.58)$$

onde w_* é a velocidade convectiva. Ressalta-se que é feita uma média deste coeficiente na variável z .

2. Coeficiente de difusão turbulento dependente da distância longitudinal da fonte para condições instáveis (SHARAN; KUMAR, 2009) é dado por:

$$K_Z(x) = \gamma Ux \quad (5.59)$$

onde γ é uma constante dada $\gamma = \left(\frac{\sigma_w}{U}\right)^2$ e σ_w é a variância da velocidade vertical (ARYA, 1995).

3. Coeficiente de difusão turbulento dependente da distância longitudinal da fonte para uma fonte baixa em condições instáveis (MOREIRA *et al.*, 2002) sendo este:

$$K_Z(x) = w_*z_i\mu X^2 \left[\left(\frac{-L_{MO}}{z} \right) + 3 \right] \quad \text{para } H_s \leq z \leq 0.1z_i \quad (5.60)$$

onde $\mu = 0.06$ é uma constante, L_{MO} é o comprimento de Monin-Obukhov e X (distância adimensional da fonte) é dado por:

$$X = \frac{w_*x}{uz_i}$$

A Eq.(5.60) pode ser escrita como:

$$K(x, z) = g(x)f(z) \quad (5.61)$$

onde :

$$g(x) = w_*z_i\mu X^2$$

e

$$f(z) = \left[\left(\frac{-L_{MO}}{z} \right) + 3 \right]$$

Desta forma, é possível escrever $f(z)$ como uma média na direção vertical, com limites definidos por $H_s \leq z \leq 0.1z_i$.

Logo a Eq.(5.60) pode ser escrita como:

$$K(x) = w_* z_i \mu X^2 F \quad (5.62)$$

onde F é a média da função $f(z)$. Esta equação é similar a Eq. (5.29).

Validação do modelo

Para avaliar o desempenho dos modelos estudados, confrontam-se os dados gerados pelos modelos (utilizando a linguagem de programação FORTRAN e MATLAB) com os dados observados no experimento de Copenhagen (experimento de fonte alta) e com os dados observados no experimento de Prairie Grass (experimento de fonte baixa).

6.1 Índices Estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados no experimento de Copenhagen e Prairie Grass é feita através de índices estatísticos presentes na literatura.

Os índices estatísticos são baseados no estudo de Hanna. Estes índices são recomendados pela Agência de Proteção Ambiental Americana (US EPA -United States Environmental Protection Agency) e pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera (HANNA; PAINE, 1989).

Em sua notação, os índices o e p indicam as quantidades observadas e previstas, respectivamente, \bar{C} é a concentração de poluente e σ o desvio.

1. Erro quadrático Médio Normalizado $Nmse$, definido como:

$$Nmse = \frac{\overline{(C_0 - C_p)^2}}{C_0 - C_p}$$

Informa sobre todos os desvios entre concentrações simuladas nos modelos C_p e concentrações observadas C_0 . É uma estatística adimensional, Quanto mais próximo de zero, maior é a confiabilidade do modelo.

2. Desvio Fracional (Fb):

$$Fb = \frac{\bar{C}_0 - \bar{C}_P}{0,5(\bar{C}_0 + \bar{C}_P)}$$

Este coeficiente informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. Quanto mais próximo de zero, maior é a confiabilidade do modelo.

3. Desvio Padrão Fracional (F_s):

$$F_s = 2 \frac{\sigma_0 - \sigma_p}{\sigma_0 + \sigma_p}$$

onde σ_0 e σ_p representam, respectivamente, os desvios padrões das concentrações observadas e simuladas. Este índice compara variabilidades dos dados observados e modelados. Quanto mais próximo de zero, maior é a confiabilidade do modelo.

4. Fator de 2 ($FAT2$) representa a fração de dados que estão entre $0.5 \leq (C_p/C_0) \leq 2$. Quanto mais próximo de 1 estiver este valor, maior é a confiabilidade do modelo.
5. Coeficiente de Correlação (Cor): denido como

$$Cor = \frac{\overline{(C_0 - \bar{C}_0)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_0 \sigma_p}$$

Este índice representa o grau de concordância entre as variáveis comparadas. Quanto mais próximo de 1 estiver este valor, maior é a confiabilidade do modelo.

6.2 Resultados

6.2.1 Experimento de Copenhagen

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos por Gryning e Lyck, onde o gás traçador Hexafluoreto de Enxofre (SF_6) foi liberado, sem empuxo, de uma torre de 115 m de altura e coletado ao nível do solo ($z \sim 0$). A liberação do traçador teve início 1h antes da amostragem e parou ao final do mesmo período de 1h (GRYNING; LYCK, 1984). A região do experimento era plana com um comprimento de rugosidade de 0,6 m, figura (6.1).

Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen são mostrados na tabela (6.1), onde L_{MO} é o comprimento de Monin – Obukhov (m), z_i é o comprimento da camada limite convectiva (m), u_* é a velocidade de fricção (m/s), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical, $U(10)$ e $U(115)$ são a velocidade do vento médio medida a

10 e 115 metros respectivamente (m/s), σ_w é o desvio padrão da componente vertical da velocidade média do vento e x é a distância de coleta horizontal da fonte.

A Tabela 6.1 apresenta os dados meteorológicos, em médias horárias, dos experimentos de dispersão de Copenhagen que foram utilizados como parâmetros de entrada no modelo, para avaliar a evolução para o regime estacionário.

Tabela 6.1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen

EXP	L_{MO} (m)	z_i (m)	u^* (m/s)	w^* (ms^{-1})	U(10) (m/s)	U(115) (m/s)	σ_w (ms^{-1})	x (m)
1	-37	1980	0.36	1.8	2.1	3.4	0.83	1900
2	-37	1980	0.36	1.8	2.1	3.4	0.83	3700
3	-292	1920	0.73	1.8	4.9	10.6	1.07	2100
4	-292	1920	0.73	1.8	4.9	10.6	1.07	4200
5	-71	1120	0.38	1.3	2.4	5.0	0.68	1900
6	-71	1120	0.38	1.3	2.4	5.0	0.68	3700
7	-71	1120	0.38	1.3	2.4	5.0	0.68	5400
8	-133	390	0.38	0.7	2.5	4.6	0.47	4000
9	-444	820	0.45	0.7	3.1	6.7	0.71	2100
10	-444	820	0.45	0.7	3.1	6.7	0.71	4200
11	-444	820	0.45	0.7	3.1	6.7	0.71	6100
12	-432	1300	1.05	2.0	7.2	13.2	1.33	2000
13	-432	1300	1.05	2.0	7.2	13.2	1.33	4200
14	-432	1300	1.05	2.0	7.2	13.2	1.33	5900
15	-104	1850	0.64	2.2	4.1	7.6	0.87	2000
16	-104	1850	0.64	2.2	4.1	7.6	0.87	4100
17	-104	1850	0.64	2.2	4.1	7.6	0.87	5300
18	-56	810	0.69	2.2	4.2	9.4	0.72	1900
19	-56	810	0.69	2.2	4.2	9.4	0.72	3600
20	-56	810	0.69	2.2	4.2	9.4	0.72	5300
21	-289	2090	0.75	1.9	5.1	10.5	0.98	2100
22	-289	2090	0.75	1.9	5.1	10.5	0.98	4200
23	-289	2090	0.75	1.9	5.1	10.5	0.98	6000

Neste experimento os dados de concentração são normalizados pela taxa de emissão ($C(x, z)/Q$), resultando a unidade $s.m^{-2}$.

As figuras (6.2) e (6.3) mostram-se os gráficos de espalhamento das concentrações integradas lateralmente, considerando-se a Eq. (5.27), com o coeficiente de difusão constante (Eq. (5.58)), para vento médio medido a 10 m (Caso 1) e 115 m (Caso 2) respectivamente.

As figuras (6.4) e (6.5) mostram-se os gráficos de espalhamento das concentrações integradas lateralmente, considerando-se a Eq. (5.59), com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte (Eq.(5.43)), para vento médio medido a 10 m (Caso 3) e 115 m (Caso 4) respectivamente.

As figuras (6.6) e (6.7) mostram-se o gráfico espalhamento da concentração das concentrações integradas lateralmente em função de diferentes ordens da derivada: $\alpha = 0.7$; $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 1.0$, considerando-se a Eq. (5.57), com o coeficiente de difusão constante

A figura (6.8) mostra-se o gráfico espalhamento das concentrações integradas lateralmente, considerando-se a Eq. (5.57), em função da derivada do melhor resultado ($\alpha = 0.9$), com o coeficiente de difusão constante (Eq. (5.58)), para vento médio medido a 115 m (Caso 6).

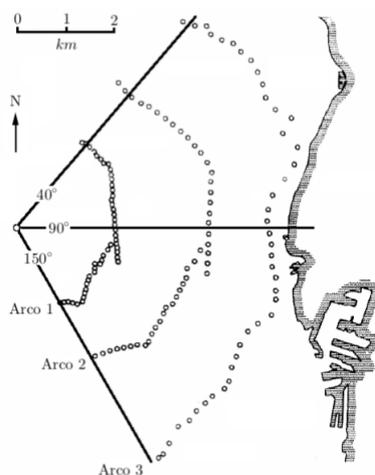


Figura 6.1: Experimento Copenhagen. Fonte: Figura adaptada de Gryning e Lyck

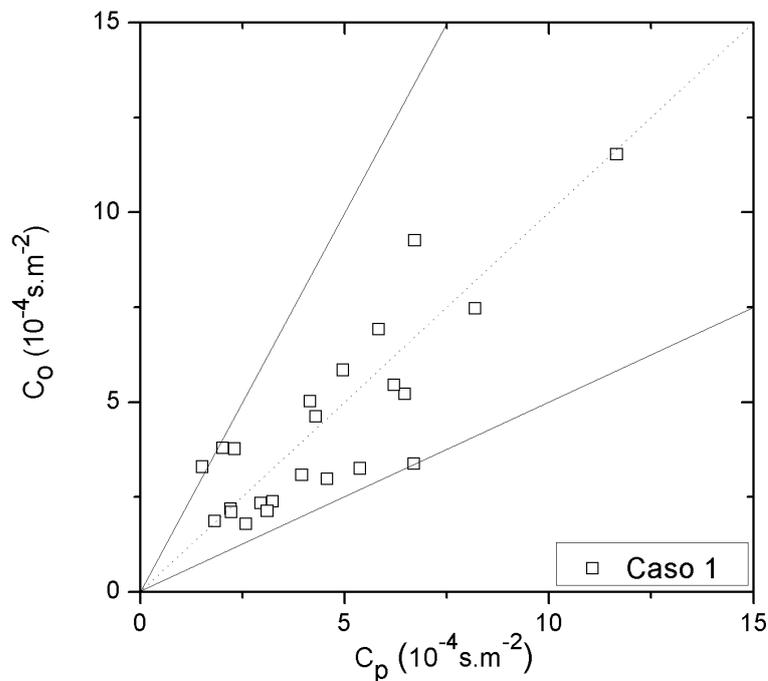


Figura 6.2: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58), com velocidade medida 10 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.

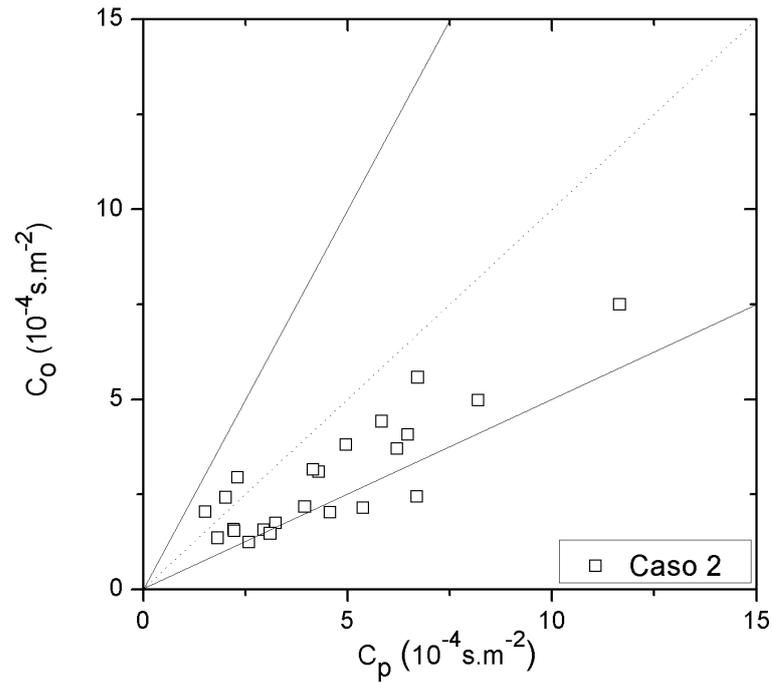


Figura 6.3: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58), com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.

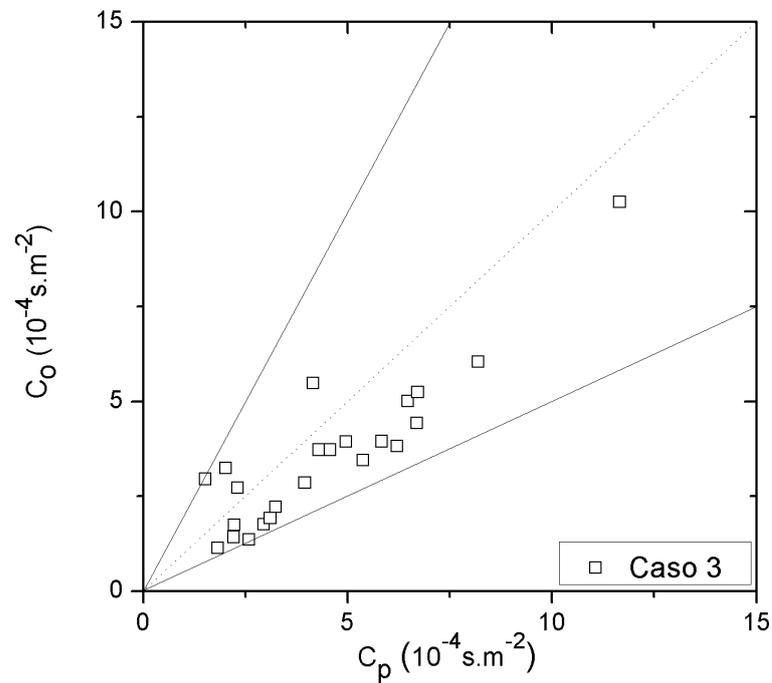


Figura 6.4: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.43), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.27), com velocidade medida 10 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.

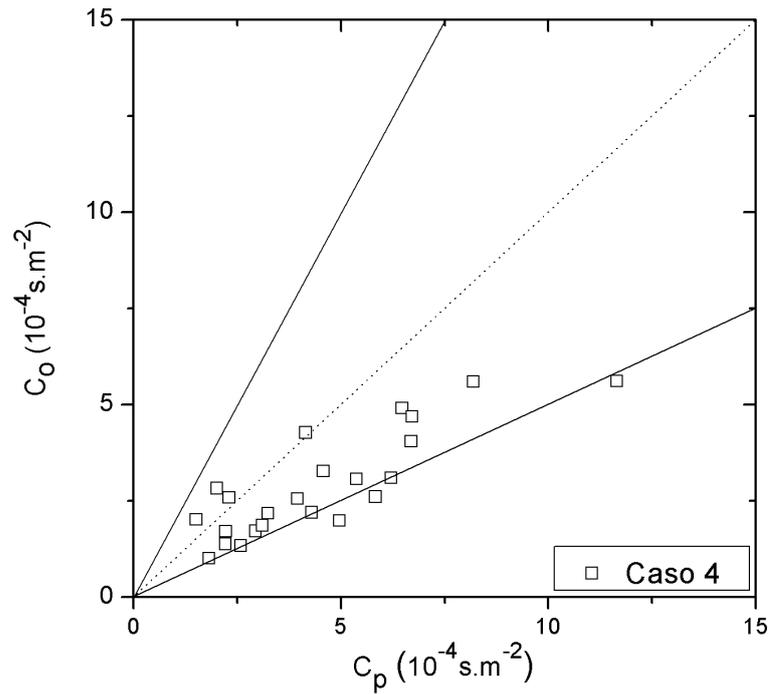


Figura 6.5: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.43), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.59), com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.

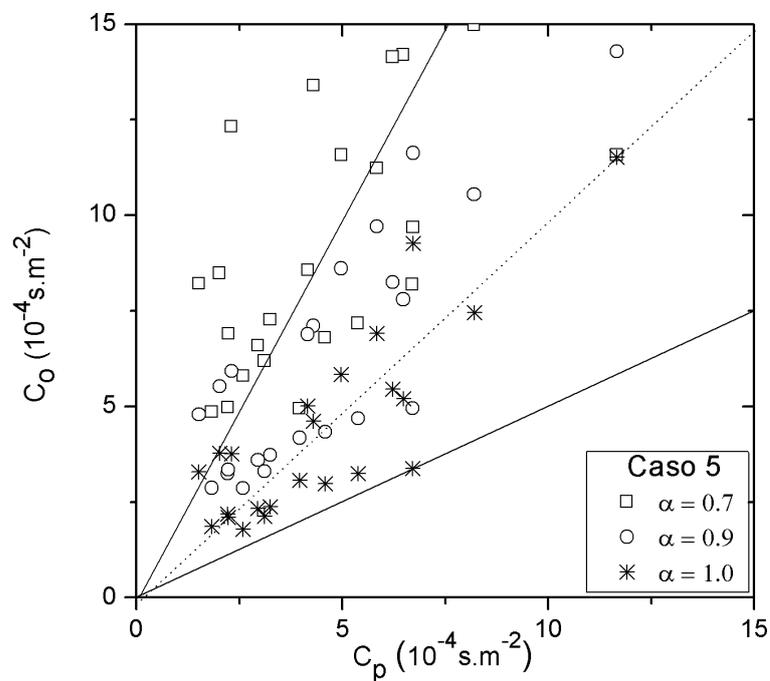


Figura 6.6: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58) com velocidade medida 10 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.

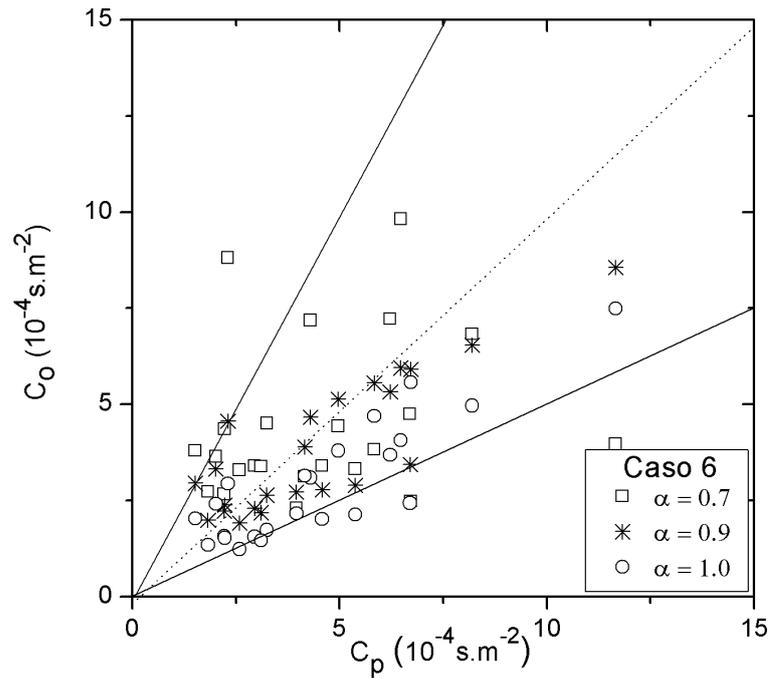


Figura 6.7: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58) com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen

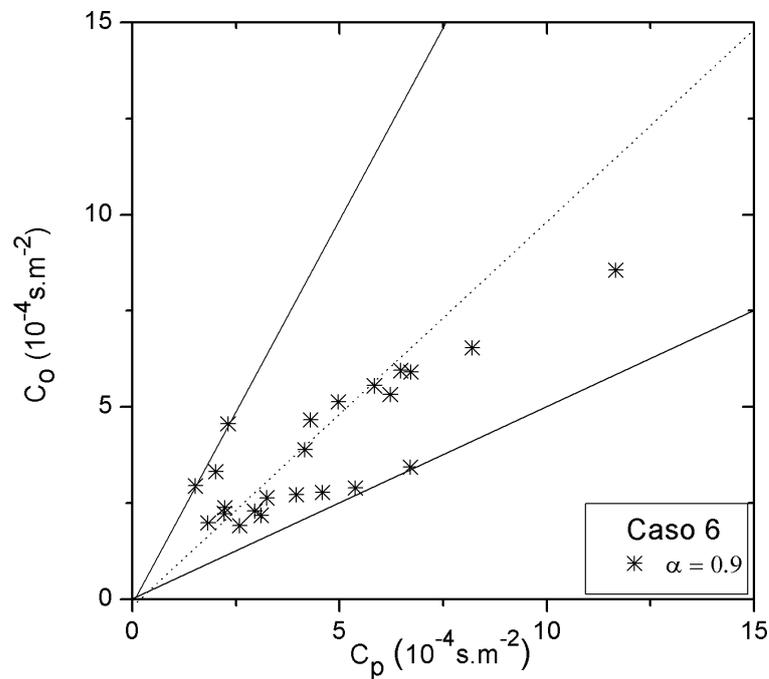


Figura 6.8: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), para $\alpha = 0.9$, utilizando o coeficiente de difusão da Eq (5.58), com velocidade medida 115 m. Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Copenhagen.

Observa-se pelas figuras 6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6 e 6.7, juntamente com a tabela 6.2, que os resultados são ligeiramente melhores para o para o Caso 3, com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte, com vento medido a 10 m de altura. Resultados similares ocorreram para o Caso 6 ($\alpha = 0.9$), porém com vento a 115 m de altura. Fica evidente o efeito de memória que foi levado em consideração no coeficiente de difusão dependente da distância da fonte e, de forma similar, com a derivada fracionária. Ressalta-se que este experimento é considerado moderadamente instável. Além disto, como esperado, os resultados para Caso 1 e Caso 5 ($\alpha = 1.0$) são idênticos, assim como Caso 2 e Caso 6 ($\alpha = 1.0$).

Na Tabela 6.2 a seguir mostram-se os resultados estatísticos do confronto dos modelos. Os melhores resultados são para erro quadrático médio normalizado (NMSE), Fracional bias (FB) e desvio padrão (FS) próximos a zero e correlação (COR) e fator de 2 (FAT2) iguais a 1.

Tabela 6.2: Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Copenhagen.

Caso	NMSE	FAT2	COR	FB	FS
Caso 1	0.09	0.96	0.85	0.04	-0.03
Caso 2	0.32	0.78	0.87	0.43	0.43
Caso 3	0.12	1.00	0.90	0.22	0.20
Caso 4	0.36	0.83	0.84	0.43	0.57
Caso 6 ($\alpha = 0.5$)	14.97	0.13	-0.06	-1.67	1.72
Caso 5 ($\alpha = 0.6$)	0.84	0.39	0.01	-0.62	-0.39
Caso 5 ($\alpha = 0.7$)	0.68	0.39	0.58	-0.67	-0.28
Caso 5 ($\alpha = 0.8$)	0.46	0.61	0.79	-0.56	-0.32
Caso 5 ($\alpha = 0.9$)	0.2	0.87	0.84	-0.32	-0.24
Caso 5 ($\alpha = 1.0$)	0.9	0.96	0.85	0.04	-0.03
Caso 6 ($\alpha = 0.5$)	1.76	0.43	-0.11	0.67	0.02
Caso 6 ($\alpha = 0.6$)	0.83	0.61	-0.05	0.22	-0.04
Caso 6 ($\alpha = 0.7$)	0.38	0.83	0.22	0.00	0.18
Caso 6 ($\alpha = 0.8$)	0.38	0.83	0.22	0.00	0.18
Caso 6 ($\alpha = 0.9$)	0.16	0.91	0.66	-0.04	0.32
Caso 6 ($\alpha = 1.0$)	0.32	0.78	0.87	0.42	0.42

Na figura 6.9 mostram-se as concentrações integradas lateralmente em função da distância da fonte, considerando-se as Eq. (5.27) e Eq.(5.58), utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.58)) e o coeficiente de difusão vertical dependente da distância da fonte (Eq.(5.43)) respectivamente, com a velocidade medida 10 m. Para esta situação utilizou-se o experimento 1 de Copenhagen.

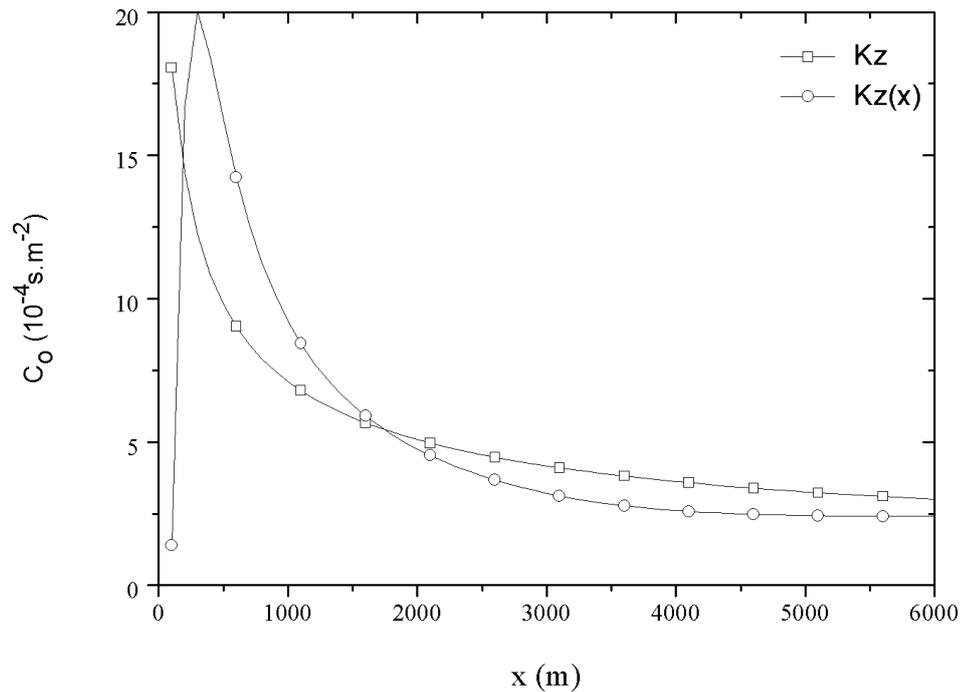


Figura 6.9: Gráfico das concentrações Observadas (C_o) em função da distância da fonte (x), para o experimento 1 de Copenhagen, com e a velocidade medida 10 m. Considerando-se as Eq. (5.27) e Eq. (5.43), utilizando os coeficientes de difusão da Eq. (5.58) e Eq. (5.59) respectivamente.

A figura 6.10 mostra a concentração integradas lateralmente em função da distância da fonte, considerando-se as Eq. (5.27) e Eq.(5.58), utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.58)) e o coeficiente de difusão vertical dependente da distância da fonte (Eq.(5.43)) respectivamente, com a velocidade medida 115 m. Para esta situação utilizou-se o experimento 1 de Copenhagen.

Pela análise das figuras 6.9 e 6.10, verifica -se que para a condição de instabilidade atmosférica, os maiores valores de concentração encontram-se mais próximos da fonte do que para condição de neutralidade, o que já era esperado devido a forte mistura de propriedades presente em situações mais convectivas.

A figura 6.11 mostra as concentrações integradas lateralmente em função da distância da fonte, considerando-se a Eq. (5.57) em diferentes ordens da derivada: $\alpha = 0.7$; $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 1.0$, utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.27)), com a velocidade medida 10 m. Para esta situação utilizou-se o experimento 1 de Copenhagen.

Na figura 6.12 mostra as concentrações integradas lateralmente em função da distância da fonte, considerando-se a Eq. (5.57) em diferentes ordens da derivada: $\alpha = 0.7$; $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 1.0$, utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.27)), com a velocidade medida 115 m. Para esta situação utilizou-se o experimento 1 de Copenhagen.

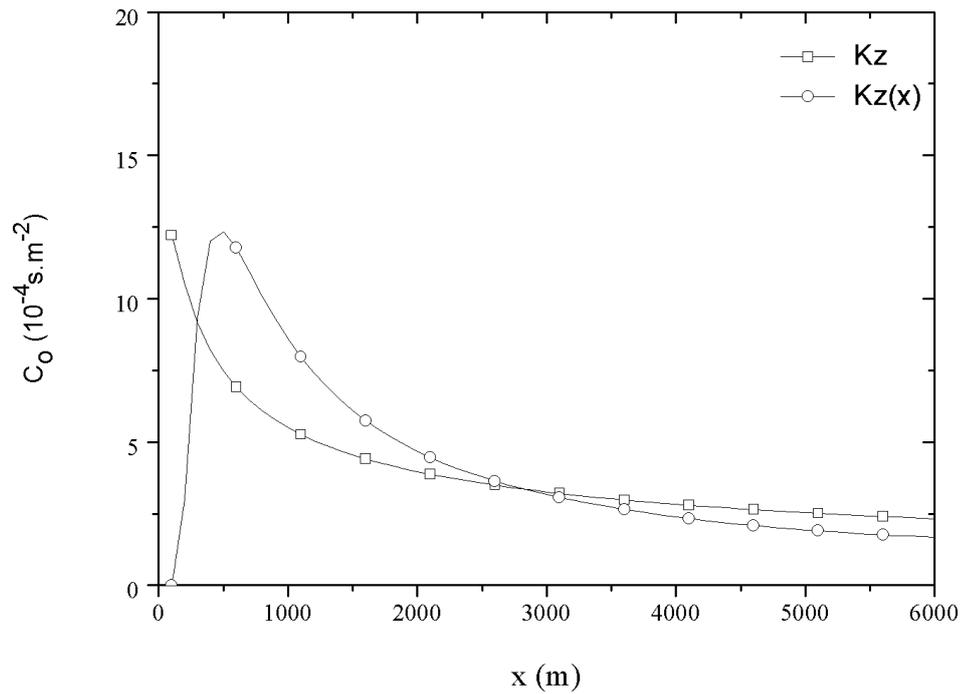


Figura 6.10: Gráfico das concentrações Observadas (C_o) em função da distância da fonte (x), para o experimento 1 de Copenhague, com e a velocidade medida 115 m. Considerando-se as Eq. (5.27) e Eq. (5.43), utilizando os coeficientes de difusão da Eq. (5.58) e Eq. (5.59) respectivamente.

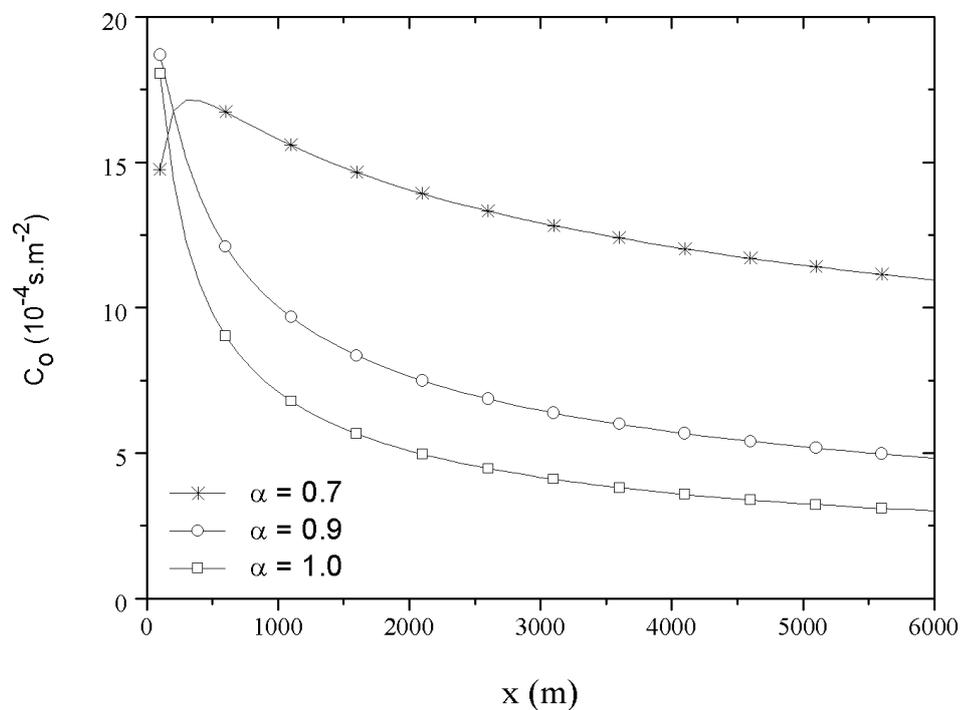


Figura 6.11: Gráfico das concentrações observadas (C_o) em função da distância da fonte (x) em diferentes ordens da derivada, para o experimento 1 de Copenhague, com e a velocidade medida 10 m. Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq. (5.58).

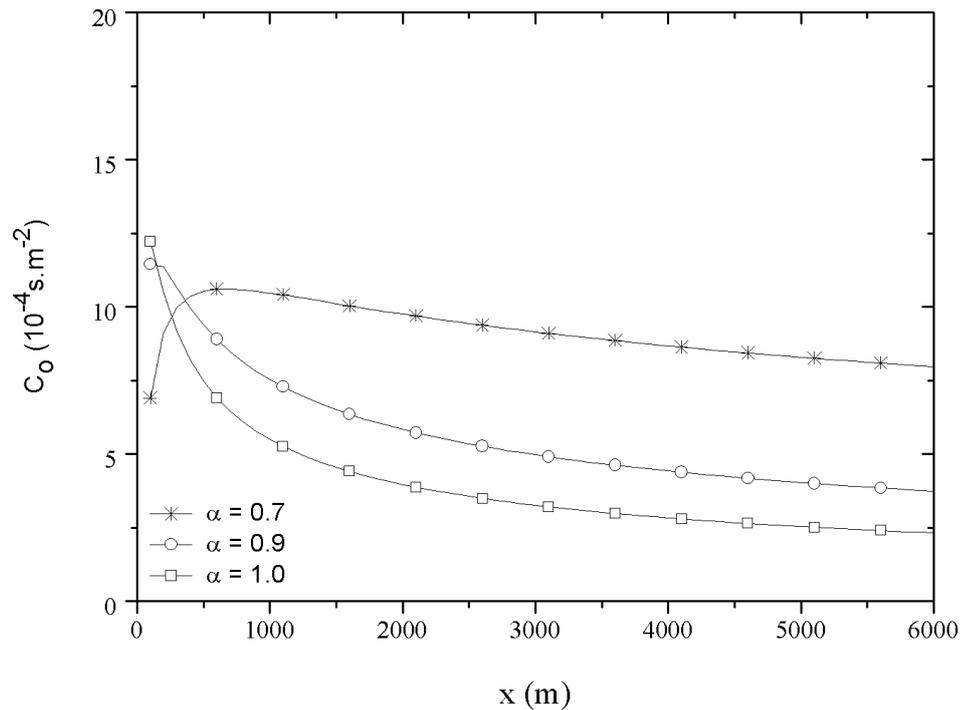


Figura 6.12: Gráfico das concentrações observadas (C_o) em função da distância da fonte (x) em diferentes ordens da derivada, para o experimento 1 de Copenhague, com e a velocidade medida 115 m. Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão da Eq. (5.58).

As figuras 6.11 e 6.12 mostram claramente que o parâmetro alfa influencia no processo de dispersão. Para a simulação com ordem inteira ($\alpha = 1.0$), observa-se maior concentração de poluentes na região próxima a fonte, com tendência a diminuir mais rapidamente para distâncias mais afastadas da fonte. A medida que alfa diminui percebe-se que o pico de concentração vai diminuindo e muda sua posição (localização do pico de concentração é um dos parâmetros mais importantes no contexto de poluição atmosférica), com tendência de manter a concentração em níveis elevados para distâncias maiores.

6.2.2 Experimento de Prairie Grass

O experimento Prairie Grass, descrito por Barad, foi realizado em O'Neill, Nebraska, no ano de 1985, sob condições atmosféricas estáveis e instáveis. Trata-se de um experimento de fonte baixa. O traçador SO_2 (dióxido de enxofre) foi lançado a partir de uma altura de 0,46 m e coletado ao nível de 1,5 m do solo (DORAN; HORST, 1985).

As concentrações foram medidas por unidades de amostragem localizadas em arcos concêntricos posicionados a distâncias de 50 m, 100 m, 200 m, 400 m e 800 m. O terreno de Prairie Grass é plano, com comprimento de rugosidade de 0,006 m. No cálculo do desvio padrão da componente vertical da velocidade média do vento (σ_w) presente na Eq. (5.59), foi usada a expressão $\sigma_w = 0.06w^*$ (WEIL, 1988).

As Tabelas (6.3) apresentam os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão de Prairie Grass em condições atmosféricas instáveis, onde L_{MO} é o comprimento de Monin – Obukhov (m), z_i é o comprimento da camada limite convectiva (m), u_* é a velocidade de fricção (m/s), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical, U_{1m} é a velocidade do vento médio medida em 1 m (m/s).

Tabela 6.3: Parâmetros micrometeorológicos do experimento Prairie Grass.

EXP	L_{MO} (m)	z_i (m)	u^* (m/s)	w^* (ms^{-1})	U (m/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	1.7	8.4	92
10	-11	950	2.01	5.4	92
15	-8	80	0.7	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	2.2	7.2	101
49	-28	550	1.73	8.0	102
50	-26	750	1.91	8.0	103
51	-40	1880	2.3	8.0	102
61	-38	450	1.65	9.3	102

Na figura 6.13 mostra-se o gráfico de espalhamento das concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo para diferentes distâncias da fonte, considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.58)), caso 7.

Na figura 6.14 mostra-se o gráfico de espalhamento das concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo para diferentes distâncias da fonte, considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão vertical dependente da distância da fonte (Eq.(5.59)), caso 8.

Na figura 6.15 mostra-se o gráfico de espalhamento das concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo para diferentes distâncias da fonte, considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão vertical dependente da distância da fonte (Eq.(5.60)), caso 9.

Na figura 6.16 mostra-se o gráfico de espalhamento das concentrações observadas inte-

gradadas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo em função dos três tipos de coeficiente de difusão Eq. (5.58), Eq. (5.60) e Eq. (5.60). Caso 7, caso 8 e caso 9 respectivamente.

Na figura 6.17 mostra-se o gráfico de espalhamento das concentrações observadas integradas lateralmente, confrontadas com os resultados do modelo, considerando-se a Eq. (5.57) em função de diferentes ordens da derivada: $\alpha = 0.7$; $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 1.0$, utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.60)), caso 10.

Na Tabela 6.4 a seguir mostram-se os resultados estatísticos do confronto dos modelos para o experimento de de Prairie Grass. Os melhores resultados são para erro quadrático médio normalizado (NMSE), Fracional bias (FB) e desvio padrão (FS) próximos a zero e fator de correlação (COR) e fator de (FAT2) iguais a 1.

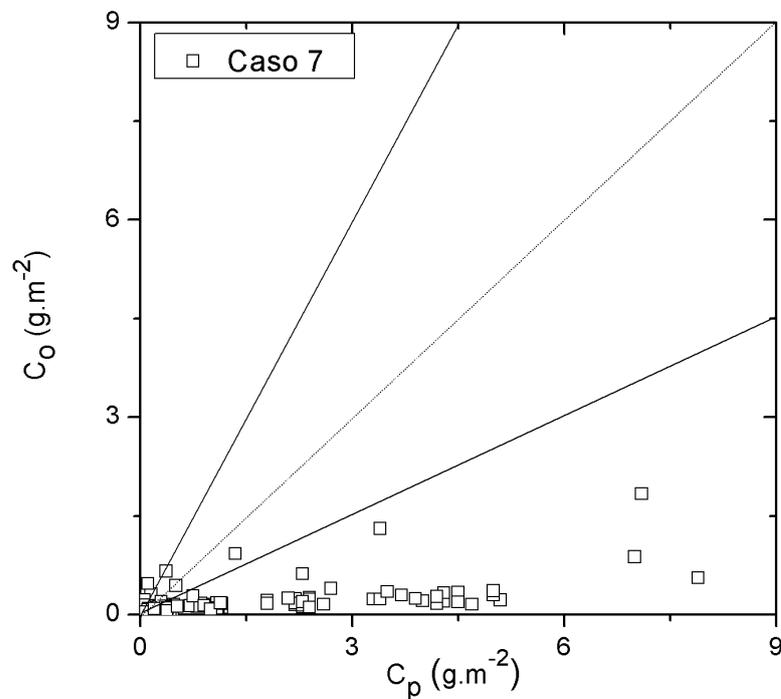


Figura 6.13: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq.(5.58). Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.

Na Tabela 6.4 a seguir mostram-se os resultados estatísticos do confronto dos modelos para o experimento de de Prairie Grass. Os melhores resultados são para erro quadrático médio normalizado (NMSE), Fracional bias (FB) e desvio padrão (FS) próximos a zero e fator de correlação (COR) e fator de (FAT2) iguais a 1.

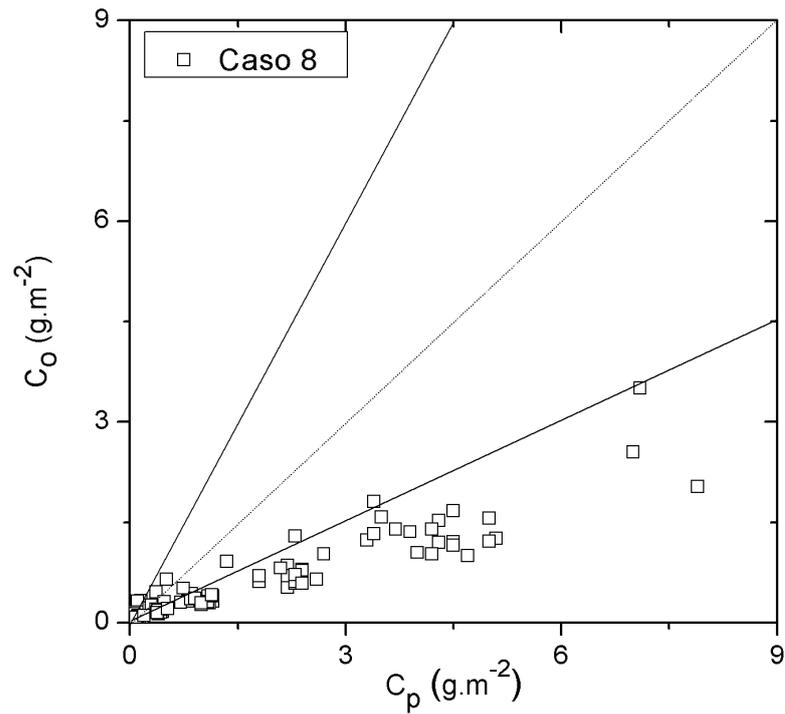


Figura 6.14: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq.(5.6) Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.

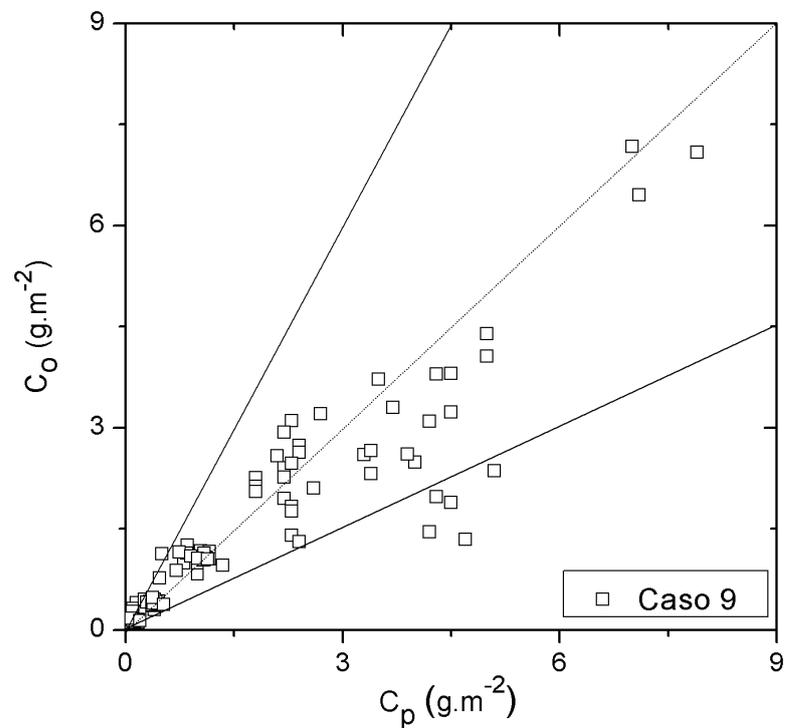


Figura 6.15: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq.(5.60) Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.

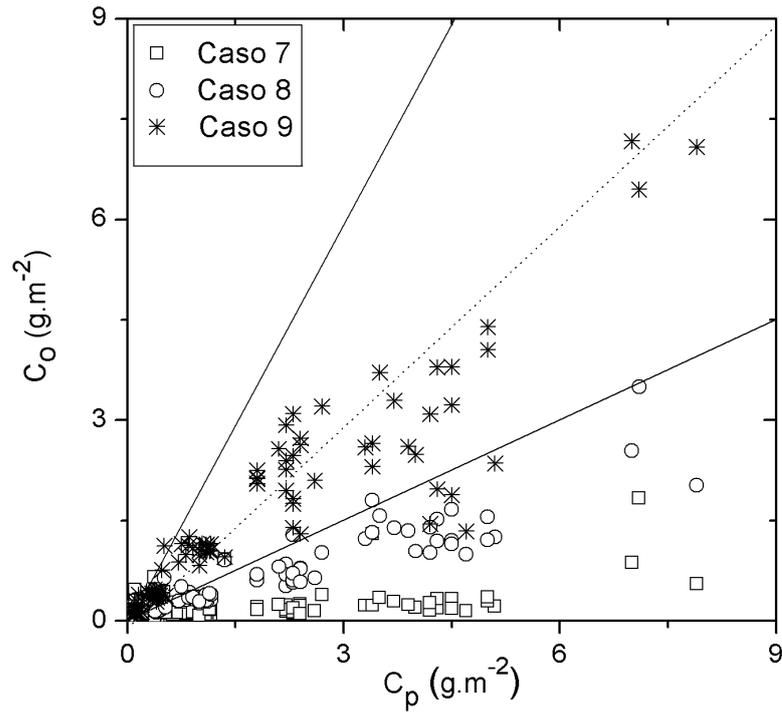


Figura 6.16: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.27), utilizando os coeficiente de difusão das Eq. (5.59), Eq.(5.59) e Eq.(5.60). Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.

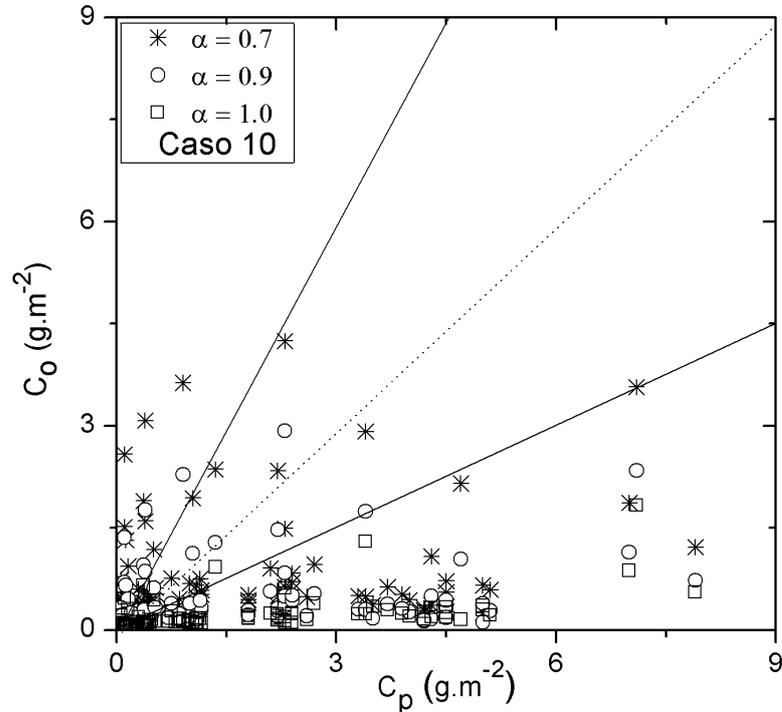


Figura 6.17: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p). Considerando-se a Eq. (5.57), utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq.(5.58)) Os pontos entre as linhas têm um fator de 2. Para o experimento de Prairie Grass.

Tabela 6.4: Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Prairie Grass.

Caso	NMSE	FAT2	COR	FB	FS
Caso 7	13.74	0.13	0.54	1.55	1.37
Caso 8	2.74	0.27	0.93	0.95	1.00
Caso 9	0.04	0.92	0.98	-0.02	0.01
Caso 10 ($\alpha = 0.5$)	2.18	0.31	0.36	0.58	0.73
Caso 10 ($\alpha = 0.6$)	3.03	0.35	0.41	0.81	0.9
Caso 10 ($\alpha = 0.7$)	3.03	0.35	0.41	1.03	1.07
Caso 10 ($\alpha = 0.8$)	6.29	0.29	0.49	1.23	1.23
Caso 10 ($\alpha = 0.9$)	6.29	0.29	0.49	1.23	1.23
Caso 10 ($\alpha = 1.0$)	13.74	0.13	0.54	1.55	1.37

Pode-se observar pela tabela 6.4 que os resultados são melhores para o Caso 9, com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte para condições fortemente instáveis (Eq. (5.60)). Nota-se também pelas figuras 6.13, 6.14, 6.15 e 6.17, a influência da distância da fonte no coeficiente de difusão, sendo que é perceptível no experimento de Prairie Grass a importância de uma boa parametrização, a qual contenha os fatores físicos mais importantes no processo de dispersão.

A solução com derivadas fracionárias não conseguiu capturar o efeito de memória e a forte convecção presente neste experimento. Como esperado, os resultados das simulações para o Caso 7 e Caso 10 ($\alpha = 1.0$) são idênticos.

A figura 6.18 mostra o gráfico da concentração adimensional integrada lateralmente ($C_y = cUz_i/Q$) em função da distância adimensional da fonte ($X = xw_*/Uz_i$) para o modelo com coeficiente de difusão constante K , modelo com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte ($K \propto x$) e modelo com coeficiente de difusão para fonte baixa ($K \propto x^2$). Além disto, os resultados fornecidos são comparados com os valores de concentração na forma adimensional observados durante o experimento de Prairie Grass.

A comparação mostra que, diferente do modelo com K constante ou ($K \propto x$), a presente parametrização com ($K \propto x^2$) reproduz muito bem as concentrações observadas integradas lateralmente. Para distâncias adimensionais maiores, o rápido declínio nas concentrações medidas pode ser explicado pela perda de material traçador nos experimentos de campo para a superfície via deposição seca (GRYNING; LYCK, 1984). O melhor ajuste foi para $\mu = 0.24$ na Eq.(5.62).

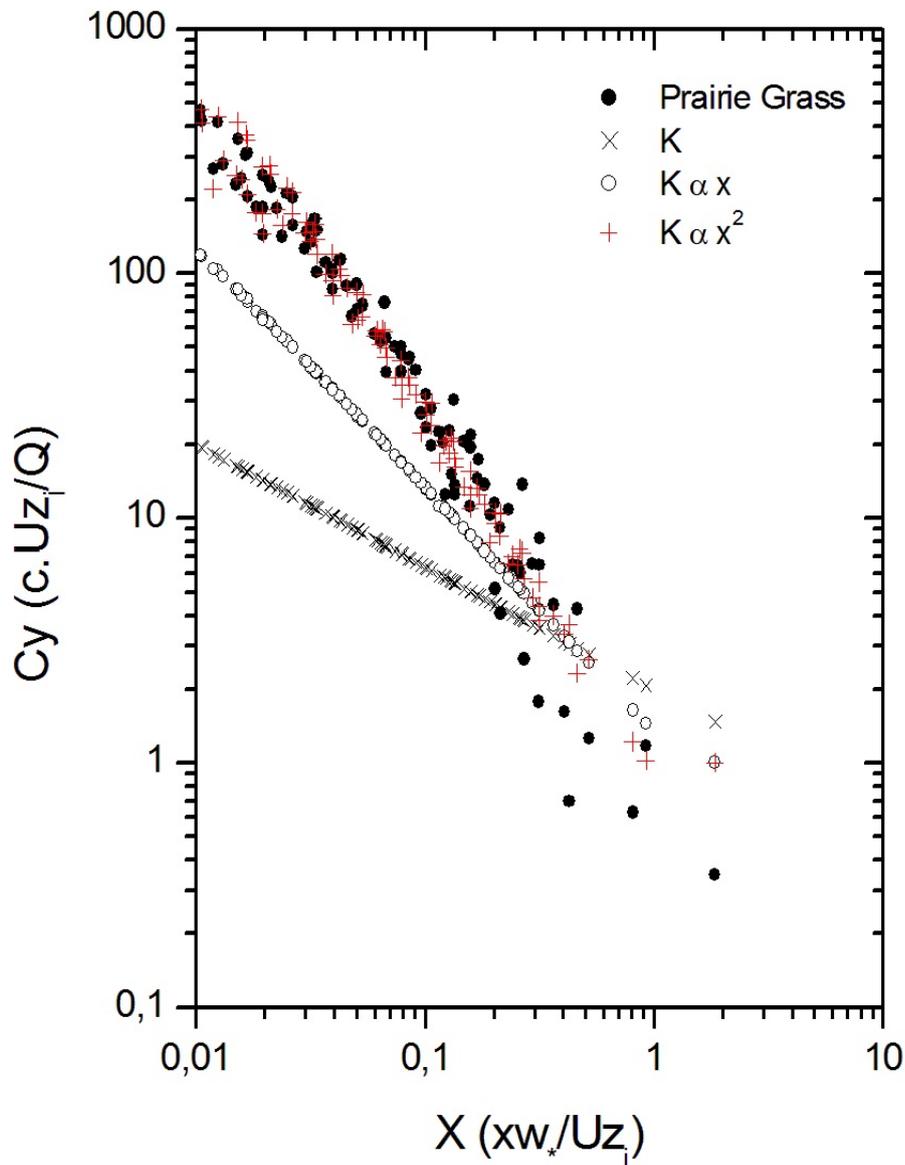


Figura 6.18: Concentração adimensional integrada lateralmente ($C_y = cUz_i/Q$) em função da distância adimensional da fonte ($X = xw_*/Uz_i$) para o modelo com coeficiente de difusão constante K , modelo com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte ($K \propto x$) e modelo com coeficiente de difusão para fonte baixa ($K \propto x^2$). Os resultados fornecidos são comparados com os valores de concentração na forma adimensional observados durante o experimento de Prairie Grass.

Conclusões

Este trabalho propõe a utilização de uma nova metodologia na obtenção de soluções da equação de difusão-advecção para simular a dispersão de poluentes emitidos na CLP. Foram apresentadas três soluções com características distintas: com coeficiente de difusão constante na vertical, com coeficiente de difusão dependente da distância longitudinal da fonte e, solução analítica da equação fracionária com coeficiente de difusão constante na vertical. Para a obtenção destas soluções aplicou-se o método MDL combinado com o conceito de derivadas fracionárias.

Analisando-se os resultados de concentração ao nível do solo observa-se que o método MDL simula bem as concentrações observadas para os tradicionais experimentos de Copenhague e Prairie Grass. Esta análise é confirmada com os índices estatísticos e gráficos de espalhamento resultantes das simulações. Entretanto, é possível afirmar que os melhores resultados das simulações do modelo para o experimento de Copenhague foram obtidos com o coeficiente de difusão dependente da distância da fonte e, no caso da equação fracionária, com coeficiente de difusão constante e $\alpha = 0.90$, onde ambos apresentaram o FAT2 com valor 1. Observa-se que o efeito de memória, o qual normalmente é considerado no coeficiente de difusão dependente da distância da fonte ($K(x)$), foi compensado com a mudança da ordem da equação fracionária. Este é um resultado interessante, pois é uma prática em problemas de dispersão na atmosfera levar em conta o efeito de memória no coeficiente de difusão.

Com relação ao experimento de Prairie Grass (fonte baixa e fortemente convectivo), analisando-se os resultados de concentração próximos ao solo foi observado que o efeito de memória devido a um coeficiente de difusão dependente da distância da fonte é muito diferente dos resultados da equação fracionária, mesmo alterando a ordem da derivada de forma significativa. Esta análise é confirmada com os índices estatísticos e gráficos de espalhamento resultantes das simulações, onde os resultados com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte ($K \propto x^2$) apresentaram um FAT2 de 0.85 e NMSE de 0.23. Observa-se que o efeito de memória não foi compensado com a mudança da ordem da equação fracionária. Obviamente, tem-se que levar em conta que a derivada fracionária está no termo advectivo e não no difusivo, o qual normalmente associa a superdifusão e subdifusão, este é um ponto a ser investigado nos trabalhos futuros. Salienta-se que neste trabalho foi obtida, pela primeira vez na literatura, a solução da equação de difusão-advecção fracionária através do método MDL em problemas atmosféricos. Esta solução é mais geral, no sentido que é possível obter-se a solução na forma tradicional, ou seja, com derivada de ordem inteira, tomando o parâmetro ($\alpha = 1.0$).

Apesar de que para lidar com situações reais é necessário usar um método numérico, é útil examinar primeiramente as possíveis soluções analíticas para obter-se um quadro conhecido. Nesse sentido, as soluções analíticas são úteis para uma variedade de aplicações, dentre as quais pode-se destacar: análises aproximadas de cenários alternativos de poluição e análises de sensibilidade para investigar os efeitos de vários parâmetros ou processos envolvidos no transporte de contaminantes.

Finalmente, é importante frisar que a grande vantagem desta metodologia, quando comparada com os demais métodos existentes na literatura, é a sua simplicidade na obtenção de uma solução analítica, onde com apenas alguns termos da série pode-se encontrar a solução geral e uma rápida convergência. Além disto, este trabalho poderá permitir um avanço na obtenção de soluções analíticas da equação de difusão-advecção para estudar e entender melhor o transporte e difusão de poluentes na atmosfera.

Referências Bibliográficas

- ADOMIAN, G. Solution of physical problems by decomposition. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 27, n. 9-10, p. 145–154, 1994.
- ARBEX, Marcos Abdo *et al.* Air pollution and the respiratory system. *Jornal Brasileiro de Pneumologia*, SciELO Brasil, v. 38, n. 5, p. 643–655, 2012.
- ARYA, S Pal. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. *Journal of Applied Meteorology*, v. 34, n. 5, p. 1112–1122, 1995.
- BLAZAR, J; GHAZVINI, H. He's homotopy perturbation method for solving systems of volterra integral equations of the second kind. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 39, n. 2, p. 770–777, 2009.
- BLACKADAR, Alfred K. *Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences*. [S.l.]: Springer, 2012.
- BOBBINK, Roland; HORNUNG, Michael; ROELOFS, Jan GM. The effects of air-borne nitrogen pollutants on species diversity in natural and semi-natural european vegetation. *Journal of Ecology*, Wiley Online Library, v. 86, n. 5, p. 717–738, 1998.
- CAPUTO, Michele. 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.
- CATALDI, Márcio *et al.* Estudo do transporte de poluentes na regioa da camada de superficie sob diversas condições de estabilidade atmosférica. In: *XI Congresso Brasileiro de Meteorologia*. [S.l.: s.n.], 2000. v. 1, p. 2890–2899.
- CHANGE, Intergovernmental Panel on Climate. *Climate Change 2014—Impacts, Adaptation and Vulnerability: Regional Aspects*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2014.
- COHEN, Aaron J *et al.* Estimates and 25-year trends of the global burden of disease attributable to ambient air pollution: an analysis of data from the global burden of diseases study 2015. *The Lancet*, Elsevier, v. 389, n. 10082, p. 1907–1918, 2017.
- DEBNATH, Lokenath. *Nonlinear partial differential equations for scientists and engineers*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011.
- DEGRAZIA, GA; VELHO, HF Campos; CARVALHO, JC. 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.
- DEGRAZIA, Gervásio A; MOREIRA, Davidson M; VILHENA, Marco T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology*, v. 40, n. 7, p. 1233–1240, 2001.

- DEMUTH, Cl. A contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 12, n. 5, p. 1255–1258, 1978.
- DIETHELM, Kai. *The analysis of fractional differential equations: An application-oriented exposition using differential operators of Caputo type*. [S.l.]: Springer, 2010.
- DORAN, JC; HORST, TW. An evaluation of gaussian plume-depletion models with dual-tracer field measurements. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 19, n. 6, p. 939–951, 1985.
- FAZELI, M; ZAHEDI, SA; TOLOU, N. Explicit solution of nonlinear fourth-order parabolic equations via homotopy perturbation method. *J. Appl. Sci*, v. 8, p. 2619–2624, 2008.
- GANJI, DD; RAFEI, M. Solitary wave solutions for a generalized hirota–satsuma coupled kdv equation by homotopy perturbation method. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 356, n. 2, p. 131–137, 2006.
- GARRATT, John Roy. The atmospheric boundary layer. *Earth-Science Reviews*, Elsevier, v. 37, n. 1-2, p. 89–134, 1994.
- GOLBABAI, A; JAVIDI, M. A variational iteration method for solving parabolic partial differential equations. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 54, n. 7, p. 987–992, 2007.
- GOULART, AGO *et al.* Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 477, p. 9–19, 2017.
- GRYNING, Sven-Erik; LYCK, Erik. 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.
- HANNA, Steven R; PAINE, Robert J. Hybrid plume dispersion model (hpdm) development and evaluation. *Journal of Applied Meteorology*, v. 28, n. 3, p. 206–224, 1989.
- HE, Ji-Huan. Homotopy perturbation technique. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 178, n. 3, p. 257–262, 1999.
- _____. Homotopy perturbation method for solving boundary value problems. *Physics letters A*, Elsevier, v. 350, n. 1, p. 87–88, 2006.
- HORST, Thomas W. A numerical study of the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 14, n. 2, p. 267–269, 1980.
- KHAN, Yasir; AUSTIN, Francis. Application of the laplace decomposition method to nonlinear homogeneous and non-homogenous advection equations. *Zeitschrift fuer Naturforschung A*, v. 65, n. 10, p. 849–853, 2010.
- KHAN, Yasir; WU, Qingbiao. Homotopy perturbation transform method for nonlinear equations using he’s polynomials. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 61, n. 8, p. 1963–1967, 2011.

- KRISHNAMURTHY, Edayathumangalam V; SEN, Syamal Kumar. *Numerical algorithms: computations in science and engineering*. [S.l.]: Affiliated East-West Press, 1986.
- LANDRIGAN, Philip J *et al.* The lancet commission on pollution and health. *The Lancet*, Elsevier, 2017.
- LEWTAS, Joellen. Air pollution combustion emissions: characterization of causative agents and mechanisms associated with cancer, reproductive, and cardiovascular effects. *Mutation Research/Reviews in Mutation Research*, Elsevier, v. 636, n. 1, p. 95–133, 2007.
- LITVINENKO, Yuri E; EFFENBERGER, Frederic. Analytical solutions of a fractional diffusion-advection equation for solar cosmic-ray transport. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 796, n. 2, p. 125, 2014.
- MONIN, Andrei S. *Statistical Fluid Mechanics: of Turbulence*. [S.l.: s.n.], 1971.
- MOREIRA, Davidson M *et al.* Dispersion parameterization applied to strong convection: Low sources case. *Hybrid Methods in Engineering*, Begel House Inc., v. 4, n. 1&2, 2002.
- MOREIRA, Davidson Martins; DEGRAZIA, Gervásio Annes; VILHENA, Marco Túlio de. Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model. *Nuovo cimento della Società italiana di fisica. C*, Compositori, v. 22, n. 5, p. 685–691, 1999.
- MOREIRA, Davidson Martins *et al.* A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 83, p. 254–259, 2014.
- MOREIRA, Davidson Martins; MORET, Marcelo Moret. A new direction in the atmospheric pollutant dispersion inside of the planetary boundary layer. *Appl. Meteor., Climatology*, v. 57, n. 1, p. 185–192, 2018.
- NIEUWSTADT, FTM; ULDEN, AP Van. A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 12, n. 11, p. 2119–2124, 1978.
- ÖBERG, Mattias *et al.* Worldwide burden of disease from exposure to second-hand smoke: a retrospective analysis of data from 192 countries. *The Lancet*, Elsevier, v. 377, n. 9760, p. 139–146, 2011.
- OLDHAM, Keith; SPANIER, Jerome. *The fractional calculus theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order*. [S.l.]: Elsevier, 1974. v. 111.
- ORGANIZATION, World Health. *Global health risks: mortality and burden of disease attributable to selected major risks*. [S.l.]: World Health Organization, 2009.
- PANOFSKY, Hans A; DUTTON, John A. *Atmospheric turbulence: models and methods for engineering applications*. [S.l.], 1984.
- PRABHAKAR, Tilak Raj *et al.* A singular integral equation with a generalized mittag leffler function in the kernel. Yokohama City University, 1971.
- ROBERTS, OFT. The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, JSTOR, v. 104, n. 728, p. 640–654, 1923.

- ROUNDS, Wellington. Solutions of the two-dimensional diffusion equations. *Eos, Transactions American Geophysical Union*, Wiley Online Library, v. 36, n. 3, p. 395–405, 1955.
- SALVI, Sundeep S; BARNES, Peter J. Chronic obstructive pulmonary disease in non-smokers. *The lancet*, Elsevier, v. 374, n. 9691, p. 733–743, 2009.
- SHARAN, Maithili; KUMAR, Pramod. An analytical model for crosswind integrated concentrations released from a continuous source in a finite atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 43, n. 14, p. 2268–2277, 2009.
- SHARAN, Maithili; MODANI, Manish. A two-dimensional analytical model for the dispersion of air-pollutants in the atmosphere with a capping inversion. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 40, n. 19, p. 3479–3489, 2006.
- SHARAN, Maithili *et al.* A mathematical model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 30, n. 8, p. 1209–1220, 1996.
- SMITH, FB. The diffusion of smoke from a continuous elevated point-source into a turbulent atmosphere. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 2, n. 1, p. 49–76, 1957.
- ŠRÁM, Radim J *et al.* Ambient air pollution and pregnancy outcomes: a review of the literature. *Environmental health perspectives*, National Institute of Environmental Health Science, v. 113, n. 4, p. 375, 2005.
- STULL, Roland B. *An introduction to boundary layer meteorology*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 13.
- ULDEN, AP Van. Simple estimates for vertical diffusion from sources near the ground. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 12, n. 11, p. 2125–2129, 1978.
- WANG, Yu-Xi; SI, Hua-You; MO, Lu-Feng. Homotopy perturbation method for solving reaction-diffusion equations. *Mathematical Problems in Engineering*, Hindawi Publishing Corporation, v. 2008, 2008.
- WEIL, JC; BROWER, RP. 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.
- WEIL, Jeffrey C. Dispersion in the convective boundary layer. In: *Lectures on Air Pollution Modeling*. [S.l.]: Springer, 1988. p. 167–227.
- WILLIAMS, AG; HACKER, JM. Interactions between coherent eddies in the lower convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 64, n. 1, p. 55–74, 1993.
- WILLIS, GE; DEARDORFF, JW. 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.
- YEH, Gour-Tsyh; HUANG, Chin-Hua. Three-dimensional air pollutant modeling in the lower atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer, v. 9, n. 4, p. 381–390, 1975.
- YILDIRIM, Ahmet; KOÇAK, Hüseyin. Homotopy perturbation method for solving the space–time fractional advection–dispersion equation. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 32, n. 12, p. 1711–1716, 2009.