



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
fracionária considerando a Lei de Fick modificada**

Apresentada por: Anderson da Silva Palmeira
Orientador: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira

Dezembro de 2018

Anderson da Silva Palmeira

Uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária considerando a Lei de Fick modificada

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: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira

Centro Universitário SENAI CIMATEC

Salvador
Centro Universitário SENAI CIMATEC
2018

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do Centro Universitário SENAI CIMATEC

P712s Palmeira, Anderson da Silva

Uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária considerando a lei de Fick modificada / Anderson da Silva Palmeira. – Salvador, 2018.

62 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. Transformada de Laplace. 2. Homotopia. 3. Equação de difusão-advecção. 4. Derivada fracionária. I. Centro Universitário SENAI CIMATEC. II. Moreira, Davidson Martins. III. Título.

CDD: 620.00113

Nota sobre o estilo do PPGMCTI

Esta dissertação de mestrado foi elaborada considerando as normas de estilo (i.e. estéticas e estruturais) propostas aprovadas pelo colegiado do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial e estão disponíveis em formato eletrônico (*download* na Página Web < http://ead.fieb.org.br/portal_faculdades/dissertacoes-e-teses-mcti.html > ou solicitação via *e-mail* à secretaria do programa) e em formato impresso somente para consulta.

Ressalta-se que o formato proposto considera diversos itens das normas da Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT), entretanto opta-se, em alguns aspectos, seguir um estilo próprio elaborado e amadurecido pelos professores do programa de pós-graduação supracitado.

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 fracionária considerando a Lei de Fick modificada”, apresentada no dia 06 de Dezembro de 2018, como requisito parcial para a obtenção do título de **Mestre em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial**.

Orientador:

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

Membro interno da Banca:

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

Membro interno da Banca:

Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima
Centro Universitário SENAI CIMATEC

Membro externo da Banca:

Prof. Dr. Erick Giovani Sperandio Nascimento
FIEB

Membro externo da Banca:

Prof. Dra. Vânia Gonçalves de Brito dos Santos
Universidade do Estado da Bahia - UNEB

Agradecimentos

A Deus, por todos os feitos e cuidados
Meu pai (José Roberto Dantas da Silva) e Minha mãe (Valquiria Santos da Silva)
Ao prof. Dr. Davidson Martins Moreira pelo direcionamento, paciência e aprendizados
A minha família; (em especial a meu filho Rafael; meus irmãos; Carolina Sacramento)
Aos colegas presentes nesta jornada de aprendizado (em especial Paulo Xavier; Eder
Pereira).

Salvador, Ba. Brasil
dia 6 de Dezembro de 2018

Anderson da Silva Palmeira

Resumo

O presente trabalho apresenta uma solução analítica para a equação de difusão-advecção considerando o modelo evolutivo bi-fluxo, combinando o método de He-Laplace com a derivada de Caputo por possuir transformada de Laplace conhecida. Logo a equação pode ser resolvida em termos de He-Laplace, com a generalização da solução analítica desta equação se obtém a função de Mittag - Laffler. O método de He-Laplace é o método de decomposição combinado com os polinômios de He, método poderoso que possibilita uma convergência com poucas interações. Ao identificar a solução analítica será utilizada para determinar e prever resultados de concentração de poluentes, por último comparados com dados experimentais oriundos do experimento de Copenhagen.

Palavras-chave: Transformada de Laplace; homotopia; equação de difusão-advecção; derivada fracionária.

Abstract

The present work presents an analytical solution for the diffusion-advection equation considering the evolutionary bi-flow model, combining the He-Laplace method with the Caputo derivative by having a known Laplace transform. Then the equation can be solved in terms of He-Laplace, with the generalization of the analytic solution of this equation we obtain the Mittag-Laffler function. The He-Laplace method is the decomposition method combined with the He polynomials, a powerful method that allows a convergence with few interactions. When identifying the analytical solution will be used to determine and predict pollutant concentration results, lastly compared with experimental data from the Copenhagen experiment.

Keywords: Laplace transform; homotopy; diffusion-advection equation; fractional derivative.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Definição do problema	3
1.2	Objetivo	4
1.2.1	Objetivos específicos	4
1.3	Aspectos metodológicos	4
1.4	Organização da Dissertação de Mestrado	4
2	Lei de Fick modificada	6
2.1	Lei de Fick	6
2.2	Fenômenos de Transporte com retenção	7
3	Revisão Bibliográfica	10
4	Camada Limite Planetária (CLP)	12
4.1	Estrutura da atmosfera	12
4.2	Camada Limite Planetária	12
4.3	Camada Limite Convectiva	13
4.3.1	Camada Superficial (CS)	14
4.3.2	Camada de Convecção Livre (CCL)	15
4.3.3	Camada Superficial (CS)	15
4.3.4	Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE)	15
4.4	Camada Residual (CR)	16
4.5	Camada Estável (CLE)	16
4.6	Generalidades da dispersão na CLC	16
5	Metodologia	19
5.1	Método da Decomposição por Laplace	19
5.2	Derivada Fracionária - Definição de Caputo	21
5.2.1	Função de Mittag-Leffer	21
5.2.2	Transformada de Laplace da derivada de Caputo	22
5.3	Solução da equação de difusão considerando a Lei de Fick modificada	22
5.4	Solução da EDA fracionária considerando a Lei de Fick modificada	27
5.5	Parametrização da turbulência	30
6	Validação do modelo	31
6.1	Resultados	31
6.1.1	Experimento de Copenhagen	31
7	Conclusão	43
	Referências	45

Lista de Tabelas

6.1	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen	32
6.2	Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Copenhagen para $u_{z(115)}$	41
6.3	Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Copenhagen para $u_{z(10)}$	42

Lista de Figuras

2.1	Distribuição simétrica com retenção $\beta = (1 - \alpha)$. Uma fração de cada conteúdo de célula permanece na célula, e a porção restante é redistribuída simetricamente para as células vizinhas com a proporção $\frac{\beta}{2}$ em cada intervalo de tempo.	8
4.1	Divisão da troposfera.	12
4.2	Evolução temporal da CLP.	13
4.3	Comportamento da pluma dispersa na CLC.	17
4.4	Comportamento da pluma dispersada na CR.	17
4.5	Comportamento da pluma dispersada na CLE.	18
6.1	Teste de convergência do modelo com $\beta = 0.50$ e valores diferentes de α (0,96, 0,98 e 1,00)	33
6.2	Perfil vertical de concentração integrada de vento cruzado para distâncias de 250 m da fonte em função de β (0,10, 0,25, 0,50, 0,75 e 1,00).	34
6.3	Perfil vertical de concentração integrada de vento cruzado para distâncias de 2500 m da fonte em função de β (0,10, 0,25, 0,50, 0,75 e 1,00).	35
6.4	Concentração integrada ao vento de nível do solo em função da distância da fonte: a) $\alpha = 1,00$ e $\beta = 0,10, 0,25, 0,50, 0,75$ e 1,00.	36
6.5	Concentração integrada de nível cruzado no nível do solo em função da distância da fonte $\alpha = 0,96, 0,98$ e 1,00 e $\beta = 0,5, 0,75$	37
6.6	Concentração no nível do solo em função de β	38
6.7	Diagrama de dispersão observado e previsto das concentrações no nível do solo com $\alpha = 0,98$ e U_{115} para valores diferentes de β (0,10, 0,25, 0,50, 0,75 e 1,00). Linhas pontilhadas indicam um fator de dois.	39

Lista de Siglas

PPGMCTI ..	Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial
WWW	World Wide Web
u	Velocidade longitudinal do vento médio
h	Altura da camada limite
α	Parâmetro de ordem fracionária
c	Concentração de poluentes
z	Variável espacial na direção vertical
H_s	Altura da fonte emissora;
x	Distância longitudinal da fonte
$\beta \mu$	Representa um parâmetro de controle da retenção e difusão.
$k_{z(1)}$	Coefficiente de difusão clássico regido pela lei de Fick's
$k_{z(2)}$	Coefficiente de difusão proposto por (BEVILACQUA <i>et al.</i> , 2016), Obedecendo uma nova lei.
L_0, L_1	Fatores de escala de comprimento
Q	Taxa de emissão
p^n	Conteúdo de massa da n ésima célula para a abordagem discreta
Γ	Função Gamma
p	Concentração em massa para a abordagem contínua
T_0	Fator de escala de tempo
Δx	Diferencial referente à variável espacial;
Δt	Diferencial referente à variável tempo;
λ	Comprimento de onda;
E_α	Função de Mittag Leffler
exp	Função exponencial
$Nmse$	Erro quadrático Médio Normalizado
Fb	Desvio Fracional
Fs	Desvio Padrão Fracional
$FAT2$	Representa a fração de dados que estão entre $0.5 \leq (C_p/C_o) \leq 2$
Cor	Coefficiente de Correlação
EDA	Equação de difusão-adevecção
CLP	Camada limite planetária
CLC	Camada limite Convectiva
CCI	Camada de Convecção Livre
CS	Camada Superficial
CLE	Camada Estável
CR	Camada Residual
ZE	Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento

Introdução

A presente pesquisa intitulada "Uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária considerando a Lei de Fick modificada" visa obter uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária considerando a Lei de Fick modificada através do método da decomposição de Laplace (HE *et al.*, 2008). De início convém mencionar que a investigação da dispersão de poluentes na atmosfera é uma atividade de fundamental importância para proteção da qualidade do ar. Nas últimas décadas, a dispersão de poluentes na atmosfera tornou-se assunto de grande relevância para a comunidade científica devido ao aumento das emissões de poluentes ocasionadas pelo crescimento das áreas urbanas e industriais. Além disso, outro fator decisivo que tem levado ao estudo sistemático da dispersão de poluentes na atmosfera é a localização dos grandes centros urbanos e industriais. Em geral, estes centros estão localizados em regiões bastantes heterogêneas em termos de relevo, tipos de solo e ocupação. Estas especificidades tornam mais difícil a caracterização da dispersão de contaminantes. O cálculo da dispersão de poluentes leva em consideração diversos fatores, sendo os mais importantes: a velocidade média do vento, direção do vento, grau de estabilidade da atmosfera, temperatura da atmosfera, relevo, características das fontes poluidoras e dos gases emitidos. Portanto, a dispersão de poluentes na atmosfera é um processo extremamente complexo. Isto é devido ao fato que os escoamentos na baixa atmosfera, na chamada Camada Limite Planetária (CLP), são governados pela turbulência, cuja física ainda permanece longe de ser completamente compreendida.

Os modelos para o cálculo da dispersão de poluentes devem ser capazes de simular em detalhes, os efeitos da turbulência para obtenção de previsões confiáveis da concentração de contaminantes. A dispersão de poluentes na CLP tem chamado à atenção de pesquisadores de muitas formas. Alguns têm trabalhado com o foco no impacto ambiental e análise de riscos, outros têm trabalhado nos vários aspectos da modelagem tais como: condições meteorológicas, mecanismos de dispersão, mecanismos de remoção, características topográficas dentre outros. Invariavelmente, a modelagem matemática tem sido o caso de muitos destes estudos, de forma que a sua importância é bem conhecida na comunidade científica (ZANNETTI, 1990), (LIN; HILDEMAN, 1997), (ARYA *et al.*, 1999). Neste sentido, existem várias aproximações que têm sido efetivamente usadas para avaliar a dispersão de poluentes atmosféricos com a obtenção da solução da equação de difusão-advecção (YEH; HUANG, 1975) (ARYA, 2003).

Apesar da equação de difusão-advecção (teoria K ou Lei de Fick) ser uma equação linear em determinados casos, ela ainda é um problema em aberto na literatura, pois não possui

solução analítica quando os parâmetros físicos envolvidos são dependentes de todas as variáveis espaciais e do tempo. A maneira mais utilizada de solucionar o problema de fechamento da equação de difusão-advecção está baseada na hipótese de transporte por gradiente (teoria K) que, em analogia com a difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média.

A simplicidade da teoria K de difusão turbulenta tem levado a utilização desta teoria como base matemática para simulação da dispersão de poluentes na CLP. Apesar de bem conhecidos os seus limites, a teoria K é largamente utilizada em muitas condições atmosféricas porque descreve o transporte difusivo de forma Euleriana, onde quase todas as medidas são Eulerianas, produzindo resultados que concordam com dados experimentais tão bem quanto qualquer modelo mais complexo, além de não exigir computacionalmente tanto quanto os modelos de ordem superior. Um problema típico com a equação de difusão turbulenta é a busca de soluções correspondentes as fontes de poluição instantâneas e contínuas.

Neste trabalho, diferentemente do modo tradicional, utiliza-se uma equação considerando-se o modelo evolutivo bi-fluxo (BEVILACQUA *et al.*, 2016), o qual apresenta a Lei de Fick modificada. Desta forma, esta equação leva em conta o processo bi-fluxo, que consiste no fluxo simultâneo de dois conjuntos de partículas espalhadas com duas velocidades distintas. O primeiro conjunto obedece à Lei clássica de Fick, o chamado fluxo primário, enquanto o segundo, denominado de fluxo secundário, segue uma nova lei, chamada de retenção. Neste trabalho, pela primeira vez, uma solução da equação resultante desta metodologia será empregada também para o estudo da dispersão de poluentes atmosféricos, tendo em vista que a grande maioria dos trabalhos usam somente a lei de Fick tradicional.

Entretanto, a presença de não linearidades e a existência de discrepâncias muito grandes de escalas temporais e espaciais complicam a seleção e a implementação de técnicas de solução satisfatórias. Desta forma, as soluções analíticas são normalmente obtidas somente fazendo-se suposições particulares sobre os coeficientes de difusão (valores constantes). Estas soluções, em geral, fornecem apenas uma boa descrição qualitativa do processo de difusão na CLP. Nas soluções analíticas, sendo os parâmetros que influenciam explicitamente expressos em uma forma matemática fechada, geralmente permitem uma análise profunda da sensibilidade dos parâmetros sobre o modelo. Além disso, códigos computacionais baseados em expressões analíticas, não necessitam de grandes recursos computacionais. Apesar de que para lidar com situações reais é necessário usar um método numérico, é útil examinar primeiramente as possíveis soluções analíticas para obter um quadro conhecido e teste de soluções. Portanto, as soluções analíticas são úteis para uma variedade de aplicações, tais como: o fornecimento de análises aproximadas de cenários alternativos de poluição; a realização de análises de sensibilidade para investigar os efeitos de vários parâmetros ou processos envolvidos no transporte de contaminantes; a

extrapolação para grandes tempos e distâncias, onde as soluções numéricas podem ser impraticáveis, servindo como soluções de referência para processos de transporte complexos que não podem ser resolvidos exatamente; e para validar soluções numéricas.

A dispersão de poluentes está sujeita à turbulência atmosférica e, como consequência, o fenômeno de difusão anômala surge naturalmente. Ao contrário da difusão comum, em que o deslocamento quadrático médio aumenta linearmente com o tempo, na difusão anômala o deslocamento quadrático médio não é linear. Nesse sentido, as equações diferenciais tradicionais (ordem inteira) não descrevem adequadamente o problema da difusão turbulenta, pois as derivadas usuais não são bem definidas no comportamento não diferenciável introduzido pela turbulência. Consequentemente, espera-se que as equações clássicas de difusão-advecção não expliquem completamente a difusão anômala de poluentes, pois neste caso os parâmetros do sistema geralmente crescem mais rapidamente que as soluções obtidas pelos modelos clássicos. Portanto, as equações de difusão fracionária representam extensões de equações básicas da física matemática e foram explicitamente introduzidas na física por (NIGMATULLIN, 1986) para descrever a difusão em meios com geometria fractal (tipos especiais de meios porosos). Normalmente, os métodos analíticos usados para resolver essas equações têm aplicações muito restritas e as técnicas numéricas comumente usadas dão origem a erros. Cabe ressaltar que o cálculo fracionário apresenta algumas diferenças com o cálculo tradicional, entre elas a regra da cadeia e derivada do produto.

Portanto, a proposta deste trabalho é a obtenção de uma solução analítica desta nova equação, a qual considera o modelo evolutivo bi-fluxo e derivadas fracionárias, utilizando-se o método da decomposição por Laplace (HE, 1999).

1.1 Definição do problema

A descrição matemática do problema de dispersão atmosférica é um assunto de grande interesse na comunidade científica. As soluções analíticas encontradas na literatura são basicamente para problemas lineares e que obedecem a Lei de Fick tradicional, e equações diferenciais de ordem inteira. A metodologia empregada neste projeto pode ser utilizada para resolver equações não-lineares e equações de ordem fracionária, sendo, portanto, um método mais geral.

1.2 *Objetivo*

Obter uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária com a Lei de Fick modificada através do método da decomposição por Laplace (HE *et al.*, 2008) e comparar os resultados simulados com dados experimentais da literatura.

1.2.1 *Objetivos específicos*

- a) Obter uma nova solução da equação de difusão-advecção modificada
- b) Implementar computacionalmente a solução obtida pelo software Wolfram Alpha
- c) Comparar os resultados obtidos das simulações com dados experimentais provenientes da literatura.

1.3 *Aspectos metodológicos*

A literatura apresenta muitas soluções analíticas para a equação de difusão-advecção na forma tradicional (MOREIRA; TIRABASSI, 2004)(ROUNDS, 1955)(DEMUTH, 1978)(NIEUWSTADT; HAAN, 1981)(TIRABASSI; TAGLIAZUCCA; GALLIANI, 1987)(TIRABASSI, 1989)(TIRABASSI, 1994). Nesse trabalho, propõe-se a solução da equação de difusão-advecção de ordem fracionária considerando-se o processo bi-fluxo(BEVILACQUA *et al.*, 2016), utilizando-se a metodologia chamada de método da decomposição por Laplace e perturbação por homotopia(HE *et al.*, 2008)(HE, 2006). A ideia essencial desse método é combinar a transformada de Laplace e o método de perturbação por homotopia. Este método conduz a uma solução sem nenhuma discretização, evitando-se com isso os erros de aproximação dos métodos numéricos. O resultado dessa combinação mostra um procedimento elegante que fornece uma solução fechada, obtida através de uma série que converge rapidamente.

1.4 *Organização da Dissertação de Mestrado*

Este documento apresenta 7 capítulos¹ e está estruturado da seguinte forma:

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

- **Capítulo 1 - Introdução:** Fornece a motivação e os objetivos do trabalho.
- **Capítulo 2 - Sobre a Lei de Fick modificada:** Apresenta a ideia da energia rotacional proposta.
- **Capítulo 3 - Revisão Bibliográfica:** Apresenta uma revisão bibliográfica do trabalho realizado na área do tema abordado.
- **Capítulo 4- Camada Limite Planetária (CLP):** Expõe uma breve revisão da camada limite planetária (CLP).
- **Capítulo 5 - Metodologia:** Ilustra o novo Método de Decomposição de Laplace (MDL) e o conceito de derivadas fracionárias.
- **Capítulo 6 - Validação do modelo matemático:** Descreve-se os dados experimentais, apresentam-se as parametrizações utilizadas e os resultados obtidos.
- **Capítulo 7 - Conclusão:** Mostra 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.

Lei de Fick modificada

2.1 Lei de Fick

De forma simplificada, a equação de difusão unidimensional que descreve a difusão da concentração a partir de uma fonte pode ser escrita como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \quad (2.1)$$

onde c é a concentração de contaminantes e $\overline{w'c'}$ é o fluxo turbulento de contaminantes na direção vertical. Um dos mais usados fechamentos para a Equação (2.1) é baseado na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão molecular, assume que a turbulência causa um movimento de material de um meio mais concentrado para um meio menos concentrado a uma taxa que é proporcional a magnitude do gradiente (PASQUILL; SMITH, 1983):

$$\overline{w'c'} = -k_z \frac{\partial c}{\partial z} \quad (2.2)$$

onde k_z é o coeficiente de difusão que normalmente é avaliado usando dados empíricos. Desta forma,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (2.3)$$

Se k_z é constante tem-se,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = k_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (2.4)$$

Na literatura existem alguns trabalhos que apresentam formas alternativas de lidar com o problema de fechamento, onde se pode citar a hipótese do contra-gradiente na área de dispersão de poluentes atmosféricos (MOREIRA *et al.*, 2005);(BUSKE *et al.*, 2007);(VILHENA *et al.*, 2008). Os fluxos de contra-gradiente são indicativos de vórtices de escala

maior na camada limite (em oposição a vórtices de menor escala que são de gradiente local) e, portanto, são frequentemente chamados de fluxos não-locais. De forma, diferente, neste trabalho assume-se a hipótese do aparecimento de um termo adicional no fechamento chamado de retenção.

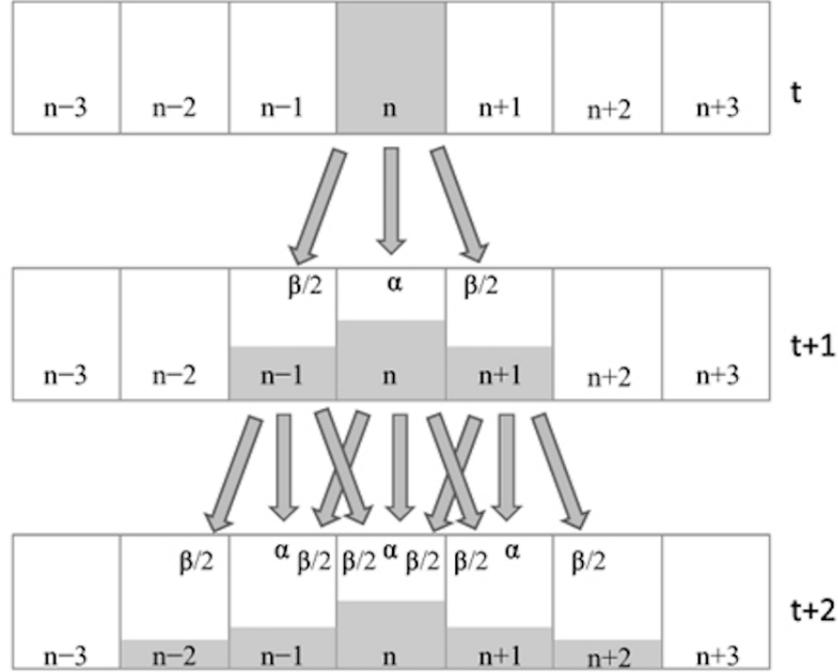
2.2 Fenômenos de Transporte com retenção

Supõe-se uma lei de distribuição que estabelece a retenção parcial com a transferência de matéria para uma célula fixada à direita ou à esquerda, ou melhor, a fração restante da capacidade de uma determinada célula n , exposta depois da retenção, que é transferida para a célula $n + 1$ ou para a célula $n - 1$. Isso significa que o movimento tem uma direção preferencial. Considere o processo descrito na Figura 2.1. A norma que regula o conteúdo da redistribuição de cada célula indica que uma parte do conteúdo denotado por kp_n é retido no número de células e a parte superior indicada por $(1 - k) \frac{p_n}{2}$ é uniformemente transferida para as células vizinhas em cada passo do tempo. Isso significa que a solução para esse tipo de distribuição varia lentamente no tempo em comparação com a solução do problema clássico de difusão. Se $k = 0$, o problema é reduzido à distribuição Gaussiana clássica. Traduzindo esta regra em expressões algébricas, obtem-se:

$$p_n^t = kp_n^{t-1} + \frac{1}{2} (1 - k) p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2} (1 - k) p_{n+1}^{t-1} \quad (2.5)$$

$$p_n^{t+1} = kp_n^t + \frac{1}{2} (1 - k) p_{n-1}^t + \frac{1}{2} (1 - k) p_{n+1}^t \quad (2.6)$$

Figura 2.1: Distribuição simétrica com retenção $\beta = (1 - \alpha)$. Uma fração de cada conteúdo de célula permanece na célula, e a porção restante é redistribuída simetricamente para as células vizinhas com a proporção $\frac{\beta}{2}$ em cada intervalo de tempo.



Fonte: (BEVILACQUA; GALEÃO; COSTA, 2011)

onde $0 < k < 1$. As operações algébricas detalhadas são mostrados em (BEVILACQUA; GALEÃO; COSTA, 2011). É importante notar que as equações devem ser trabalhadas com cuidado, caso contrário, pode-se obter uma equação que não reproduz as soluções necessárias para os limites $k = 1$ e $k = 0$. Portanto, é necessário testar as expressões intermediárias em passos críticos para garantir que as suposições iniciais subjacentes às Equações ((2.5); (2.6)) sejam preservadas. Isto significa que para $k = 0$, correspondendo a nenhuma retenção, a distribuição Gaussiana clássica deve ser recuperada e, para o outro limite, quando $k = 1$, a solução deve ser estacionária, isto é, o conteúdo de cada célula permanece constante. Reescrevendo a expressão, se obtém:

$$\frac{p_n^{t+\Delta t}}{\Delta t} \Delta t = \frac{(1-k)}{2} \left\{ -(\Delta x)^4 \frac{k}{2} \frac{\Delta x^4 p_n}{(\Delta x^4)} + (\Delta x^2) \left[\frac{\Delta^2 p_n}{(\Delta x^2)} + 2 \frac{O(\Delta x^3)}{(\Delta x)^2} \right] \right\}^{t-\Delta t} \quad (2.7)$$

onde $\Delta^2 p_n$ e $\Delta^4 p_n$ representam as diferenciais de segunda e quarta ordem, respectivamente. Supondo-se:

$$\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} = \left(\frac{L_0}{m} \right)^2 \frac{m^2}{T_0} = \frac{L_0^2}{T_0} \quad (2.8)$$

$$\frac{(\Delta x)^4}{\Delta t} = \left(\frac{L_1}{\sqrt{m}} \right)^4 \frac{m^2}{T_0} = \frac{L_1^4}{T_0} \quad (2.9)$$

onde L_0 , L_1 e T_0 são fatores de escala e $\Delta x = \frac{L_0}{m} = L_1$, e $\Delta t = \frac{T_0}{m^2}$ são os tamanho da célula e o intervalo de tempo, respectivamente. Substituindo-se as relações acima na Equação (2.7), se tem:

$$\frac{p_n^{t+\Delta t}}{\Delta t} \Delta t = \frac{(1-k)}{2} \left\{ \frac{L_0^2}{T_0} \left[\frac{\Delta^2 p_n}{\Delta x^2} + 2 \frac{O(\Delta x^3)}{\Delta x^2} \right] - \frac{k L_1^4}{2 T_0} \frac{\Delta x^4 p_n}{\Delta x^4} \right\}^{t-\Delta t} \quad (2.10)$$

Os fatores de escala L_0 , L_1 e T_0 , juntamente com o parâmetro m , fornecem pistas muito úteis para definir os tamanhos do incremento de espaço e do intervalo de tempo para a integração numérica da equação de diferenças finitas. Note que com $k = 0$, Eq. (2.10) reduz-se ao problema clássico de difusão, isto é, sem retenção, e com $k = 1$, Eq. (2.10) representa um comportamento estacionário, pois o termo do lado direito de (2.10) desaparece. Consequentemente, a taxa de tempo da variação do conteúdo é igual a zero para todo o t para todas as células. Chamando $k_2 = \frac{L_0^2}{2T_0}$, $k_4 = \frac{L_1^4}{4T_0}$ e assumindo que $p(x, t)$ é uma função suficientemente suave de x e t , logo se pode tomar os limites como $\Delta x \rightarrow 0$ e $\Delta t \rightarrow 0$, obtendo-se:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = (1-k) k_2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - k(1-k) k_4 \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \quad (2.11)$$

O termo de quarta ordem com sinal negativo introduz o efeito de retenção (BEVILACQUA *et al.*, 2013). Os coeficientes k_2 e k_4 são constantes generalizadas. É importante manter os parâmetros $(1-k)$ e $k(1-k)$ explicitamente na equação, porque eles são parâmetros de controle que expressam o equilíbrio entre difusão e retenção quando ambos são ativados simultaneamente. Para k próximo de zero, a difusão prevalece e, para k próximo de um, prevalece a retenção. O efeito de retenção atinge o seu máximo para $k=0,5$. Claramente, a retenção não pode ser ativada sem difusão, isto é, enquanto a difusão pode ocorrer sem retenção, o processo complementar, isto é, a retenção sem difusão não é possível.

Revisão Bibliográfica

A equação de difusão-advecção com fechamento da turbulência usando a Lei de Fick tradicional, tem sido muito utilizada na obtenção de modelos operacionais para o controle da qualidade do ar com a determinação do campo de concentração de poluentes. A primeira solução da equação de difusão-advecção foi a bem conhecida solução Gaussiana, devido a Fick, na metade do século XIX. Neste contexto, pode citar os trabalhos de (ROBERTS, 1923),(ROUNDS, 1955), (SMITH, 1957),(SCRIVEN; FISHER, 1975),(YEH; HUANG, 1975), (BERYAND, 1976),(DEMUTH, 1978) (TIRABASSI; TAGLIAZUCCA; ZANNETTI, 1986) (TIRABASSI, 1989) (TIRABASSI; RIZZA, 1992),(ULDEN, 1978) (TIRABASSI T; RIZZA, 1995),(NIEUWSTADT; ULDEN, 1978),(HORST, 1980),(KOCH, 1989),(LIN; HILDEMANN, 1997),(ADOMIAN, 2013), entre outros. Uma grande variedade de soluções numéricas da equação de difusão-advecção pode ser encontrada na literatura (ALBANI; DUDA; PIMENTEL, 2015).

Recentemente, foram obtidos modelos aplicando-se a técnica semi-analítica ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*) que vem sendo utilizada para solucionar uma vasta gama de problemas (MOURA, 1995), (PIRES, 1996), (MOREIRA; DEGRAZIA; VILHENA, 1999), (MANGIA *et al.*, 2002), (BULIGON, 2004); (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2004),(COSTA, 2007),(COSTA *et al.*, 2009),(MOREIRA; CARVALHO; VILHENA, 2005),(GUERRERO *et al.*, 2012), (RUI; COSTA, 2016),(MOREIRA *et al.*, 2009),(MOREIRA *et al.*, 2014). A solução é obtida pelo uso da transformada de Laplace com inversão numérica.

Além disso, outra solução foi obtida com grande sucesso utilizando-se a nova técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Diferentemente do tradicional método GITT (COTTA, 1993),(MIKHAILOV; OZISIK, 1984), (KUMAR; BASU, 2014), (BUSKE, 2004) este novo método é totalmente analítico. O problema é resolvido pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização (WORTMANN; MOURA; VILHENA, 2000),(WORTMANN *et al.*, 2005); (MOREIRA; CARVALHO; VILHENA, 2005). É importante salientar que todos os problemas anteriormente citados e resolvidos pelas técnicas ADMM e GILTT foram sempre envolvendo equações lineares e todas as equações de ordem inteira, usando Lei de Fick tradicional. Fenômenos importantes que ocorrem em vários campos da engenharia e ciências são frequentemente modelados através de equações diferenciais lineares e não-lineares. Portanto, é ainda muito difícil obter-se soluções de forma fechada para problemas da vida real.

Desta forma, uma grande classe de métodos analíticos e numéricos tem sido usada para

resolver alguns problemas. Mais recentemente, alguns métodos têm sido propostos, tais como: método da decomposição de Adomian (ADOMIAN, 1988), método variacional, transformadas integrais e método da decomposição por Laplace, mas todos têm suas limitações. Neste projeto, pretende-se avançar com a utilização do método da decomposição por Laplace (HE, 2003)(HE, 2006)(HE *et al.*, 2008)(HE, 2006) para resolver equações lineares em problemas atmosféricos. Este tipo de metodologia (aplicação simultânea de diferentes técnicas) representa o estado da arte na modelagem de diferentes problemas físicos, os quais até pouco tempo atrás não seria possível obtenção de uma solução analítica. Apesar do avanço na solução de equações de ordem inteira, tem havido uma forte motivação para uso de equações de ordem não-inteira, isto é, derivadas fracionárias, que considera a difusão anômala que vem da turbulência atmosférica (DEBNATH, 2003). Recentemente algumas soluções foram propostas para a equação advecção-difusão de ordem fracionária. A primeira foi proposta por (GOULART *et al.*, 2017) através do método de separação de variáveis, e a segunda foi proposta por (MOREIRA; MORET, 2018) utilizando a técnica de transformações integrais.

No entanto, apesar desses avanços recentes, ainda existe uma lacuna na literatura em relação à obtenção de soluções analíticas das equações de difusão-advecção com derivadas inteiras e de ordem fracionária em problemas de dispersão atmosférica. Este é particularmente o caso em soluções obtidas usando a decomposição de Laplace e o método de perturbação de homotopia, que são os principais objetivos deste trabalho. O método de perturbação de homotopia foi desenvolvido pelo matemático chinês He (HE, 1999),(HE, 2006),(HE, 2009), que resolveu uma ampla variedade de problemas lineares e não lineares em diversas áreas (GANJI; RAFEI, 2006), (WANG; SI; MO, 2008). (YILDIRIM; KOÇAK, 2009). Assim, a novidade do presente trabalho está no uso do método de perturbação por homotopia acoplado à transformada de Laplace, para resolver a equação de advecção-difusão de ordem inteira e fracionária, com Lei de Fick modificada, em problemas atmosféricos. Esta metodologia é uma combinação elegante e pode fornecer uma solução exata (ou aproximada) para uma determinada equação de uma maneira mais simples do que os métodos tradicionais encontrados na literatura. Cabe ressaltar que há muitos modelos e soluções analíticas para problemas difusivo-advectivos expostos na literatura. Todavia, a aplicação do método MDL em problemas atmosféricos ainda é uma área pouco explorada.

No próximo capítulo será analisada a camada limite planetária indicando os processos físicos que ocorrem neste região da baixa atmosfera.

Camada Limite Planetária (CLP)

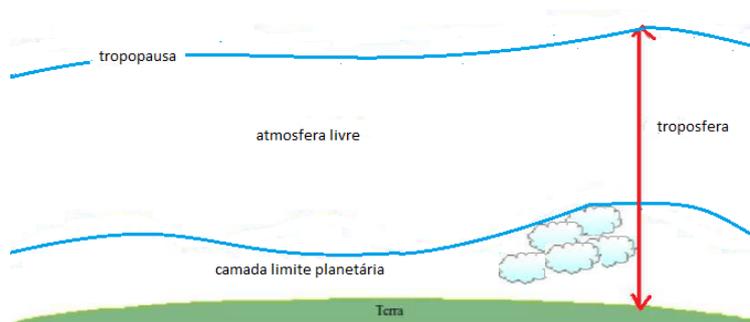
4.1 Estrutura da atmosfera

A atmosfera do nosso planeta é formada por uma camada de ar envolvida por gases, vapor d'água e particulados. Essa atmosfera é composta por: Troposfera, Estratosfera, Mesosfera e Termosfera. No âmbito desta pesquisa, os estudos se concentram focando a Troposfera, logo por Troposfera entende-se a camada com menor distância da superfície da terra, com dimensão variando entre 9 a 16 km, local onde se observa os fenômenos de interesses meteorológicos.

4.2 Camada Limite Planetária

A concentração de poluentes em uma determinada região se deve em grande parte às condições meteorológicas locais. Por isso, para a avaliação da dispersão de poluentes é imprescindível o conhecimento dos fenômenos que regem a atmosfera. A troposfera pode ser dividida em duas partes: uma camada adjacente à superfície terrestre, chamada Camada Limite Planetária (CLP), e a camada acima desta, chamada Atmosfera Livre, como pode ser visto na Figura 4.1 .

Figura 4.1: Divisão da troposfera.

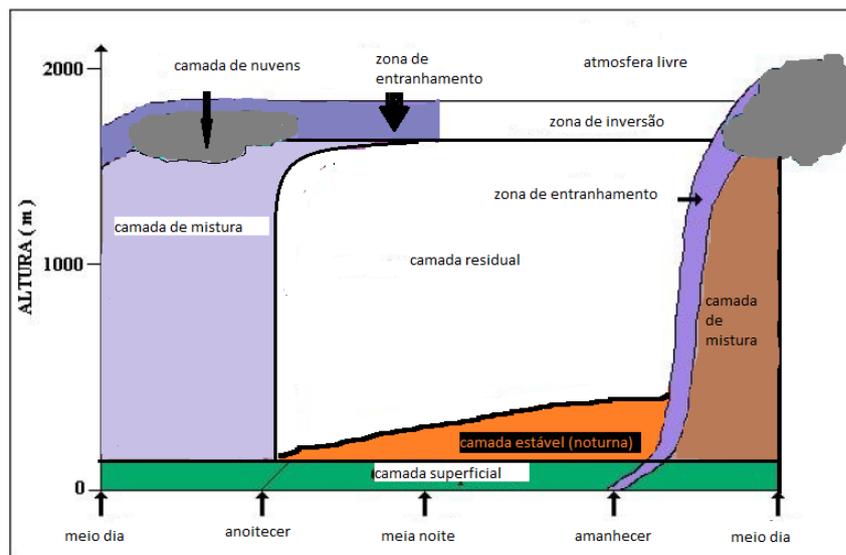


Fonte: (STULL, 2012) figura adaptada

A parte da atmosfera que é influenciada diretamente pela superfície da terra e que responde a forçantes superficiais, tais como os fluxos de calor e umidade, forças de atrito, evaporação e transpiração, emissão de poluentes e modificação de fluxo induzida pelo terreno, em uma escala de tempo de uma hora ou menos é denominada Camada Limite Planetária (CLP). A espessura da CLP varia de 100 m a 3000 m de altura a partir da superfície e é uma função direta dos forçantes térmicos e mecânicos (produção de tur-

bulência pode ocorrer por empuxo e/ou cisalhamento do vento). A variação diurna de temperatura na CLP é uma de suas principais características, sendo assim esta variação é provocada pelo aquecimento e resfriamento da superfície da terra. A radiação de onda longa, proveniente do solo que absorve cerca de 90 % da radiação nos dias ensolarados, faz com que a variação diurna seja bastante acentuada próximo ao solo e não ocorre a grandes altitudes. As massas de ar quente que se elevam a partir da superfície (gradiente de transporte positivo) são chamadas termas, turbilhões ou vórtices. Nessa camada, os ventos médios são responsáveis pelo transporte horizontal rápido (advecção) das espécies como umidade, calor, *momentum* e os poluentes. Estes ventos variam normalmente entre 2 a 10 m/s. Já o transporte vertical é dominado pela turbulência que é constituída de vários turbilhões que se sobrepõem e cujos tamanhos são variáveis (da ordem de 1 mm a 3000 m de diâmetro). A soma das contribuições de todos estes turbilhões constitui o espectro de energia turbulenta. Sobre a superfície do solo em regiões de alta pressão a camada limite tem uma estrutura bem definida que envolve um ciclo diurno de acordo com os processos físicos que nela ocorrem na Figura 4.2.

Figura 4.2: Evolução temporal da CLP.



Fonte: (STULL, 2012)

4.3 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 se constitui após a alvorada, tem início no momento em que o chão aquece, o qual por condução aquece o ar em contato com ele. Este ar aquecido é mais leve que o ar adjunto (mais frio) e, se inclina a subir; enquanto o ar mais frio se inclina a descer (fluxo de calor positivo) procedendo a convecção térmica.

Além disso, a pluralidade das fontes poluidoras está vizinha do solo, deste modo os contaminantes concentrados podem ampliar 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 níveis ainda maiores.

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 $z = h$. 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 $z = h$ a temperatura potencial começa a aumentar.

Pode-se determinar a CLP desmembrada em quatro camadas: camada superficial, camada de convecção livre, camada de mistura e camada interfacial de estranhamento.

4.3.1 Camada Superficial (CS)

A Camada Superficial demonstra uma grande taxa de variação de temperatura e velocidade e o fluxo turbulento é sensivelmente constante, no qual a turbulência mecânica (cisalhamento do vento) é marcante. É reservada a alturas menores do que $Z \leq [L]$, onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, determinado por:

$$L = \frac{u_*^3}{k \frac{g}{\theta} (\overline{w\theta})_0} \quad (4.1)$$

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 (PANOFSKY; DUTTON, 1984), uma CLC é considerada bem desenvolvida quando $[L]$ apresenta valores típicos entre 10 e 100m, de modo que $h/[L] \geq 10$. Desta forma, essa razão pode ser considerada um parâmetro de estabilidade, pois retrata o papel da turbulência de cisalhamento do vento.

- Convecção fraca: $h/[L] < 5$;
- Convecção moderada: $5 < h/[L] < 10$;
- Convecção alta: $h/[L] > 10$;

4.3.2 Camada de Convecção Livre (CCL)

Nesta camada ocorre a transformação compreendida entre a Camada Superficial e a Camada de Mistura. A CLC está entre $[L] < z < 0.1h$, nesta camada a velocidade, não é importante, mas a escala z ainda é. Efetivamente u^* nunca chega à zero na prática, mas a condição de convecção livre local determina a escala da estrutura da turbulência (WILLIAMS; HACKER, 1993).

4.3.3 Camada Superficial (CS)

Assimilada como a parte soberana da CLC, onde está fixada na região compreendida entre $[L] < z < h$, e tem este nome devido à intensa mistura vertical que tende a conservar as variáveis como: temperatura potencial, velocidade do vento (sensivelmente constante), turbulência e a umidade. Ademais, os parâmetros de maior relevância para a descrição desta camada são h e a escala convectiva w_* (WILLIS; DEARDORFF, 1976), representada por:

$$L = w_* = \left(\frac{g}{\theta} (\overline{w\theta}) h \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.2)$$

As dimensões dos elevados turbilhões convectivos são retratadas em função de h e as velocidades turbulentas são proporcionais a w_* . Os típicos valores de h e w_* são 1000 m a 2000 m e 2m/s, respectivamente (WEIL; BROWER, 1984)

A escala de tempo convectiva $\frac{h}{w_*}$ é da ordem de 10 a 20 minutos em muitos casos. Período característico de tempo para o ar circular entre a superfície e o topo da CM. Logo, mudanças nas forçantes do solo podem conectar com o resto da CM em um curto espaço de tempo (entorno de 15 minutos).

4.3.4 Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE)

Camada compreendida na crista da CLP, junto da atmosfera livre e a CM. A Zona de Entranhamento é a região de ar estaticamente estável na crista da camada de mistura, onde há entranhamento de ar da atmosfera livre abaixo e penetração convectiva das plumas térmicas para cima. Esta zona é caracterizada pela transformação térmica e por restringir os movimentos da Camada de Mistura (CM).

4.4 *Camada Residual (CR)*

O processo de declínio dos elevados turbilhões tem início na CR, constituindo a CLC. Este fenômeno tem ocorrência entre 20min e 60min anterior ao pôr-do-sol. A turbulência nesta secção o resíduo é gerado por convecção, ao longo do dia, e a energia é aproximadamente análoga em suas direções. Ocasionalmente deste modo, plumas emissoras dentro da CR. Inclina-se a dispersar de forma homogênea.

4.5 *Camada Estável (CLE)*

A Camada Limite Estável (CLE) ou camada noturna aparece antes do pôr-do-Sol. Constitui-se pelo resfriamento noturno da superfície terrestre. Neste resfriamento se provoca um fluxo de calor menor que zero, e remove a energia cinética dos elevados turbilhões. Logo, as plumas emissoras na CLE se dispersam suavemente na vertical e mais acelerado na horizontal e tem uma turbulência enfraquecida. Nesta camada atinge-se altura de 100-300m e é composta por pequenos turbilhões.

4.6 *Generalidades da dispersão na CLC*

Na CLC, como exposto antes, se dispõe da condição atmosférica instável. A instabilidade tem início proveniente do deslocamento de ar quente ascendente *updrafts* e do deslocamento de ar frio descendente *downdrift*, provocado pela ocorrência de raios do sol com aquecimento da superfície. Nesta situação temos a condição superadiabática. As plumas poluidoras emitidas na CLC representam uma singularidade de *looping* Figura 4.3. Expressando uma singularidade homogênea de contaminantes, livremente da elevação da fonte emissora.

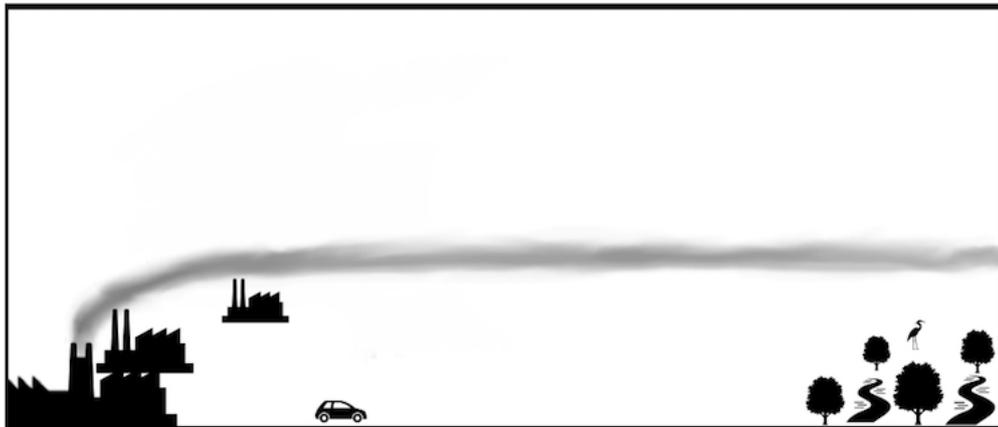
Figura 4.3: Comportamento da pluma dispersa na CLC.



Fonte: Aatoria própria, 2018

Na condição neutra a CLP, presente na camada limite residual, sua pluma se inclina a dispersasse em igual intensidade nas duas direções (horizontal e vertical), ocorrência da turbulência efetiva a ser sensivelmente análoga em todas as direções. Os contaminantes dispersos na CR apresentarão uma tipicidade de *Conning* Figura 4.4.

Figura 4.4: Comportamento da pluma dispersada na CR.



Fonte:Autoria própria, 2018.

Nas condições de atmosfera estável, particularidade da CLE, ocorrência devido à baixa difusão da atmosfera, devido a condições de estabilidade a força turbulenta é significativamente diminuída. Nesta condição os poluentes emitidos sofrem dispersão somente pela

ação do vento médio na horizontal exibindo uma característica de *fanning* Figura 4.5.

Figura 4.5: Comportamento da pluma dispersada na CLE.



Fonte: Autoria própria, 2018.

O entendimento deste capítulo é de fundamental importância para a compreensão da física do problema e a região que é objeto de estudo a CLP. No próximo capítulo será abordada a metodologia proposta neste trabalho.

Metodologia

Neste capítulo é apresentado o método da decomposição por Laplace (MDL) e o conceito de derivadas fracionárias aplicados em problemas de dispersão de poluentes na CLP.

5.1 Método da Decomposição por Laplace

A ideia do método pode ser exposta pela equação diferencial não-linear e não-homogênea, na seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} + Ry(x, t) + Ny(x, t) = f(x, t) \quad (5.1)$$

com as condições iniciais dadas por:

$$y(x, 0) = \alpha(x) \quad (5.2a)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t}(x, 0) = \beta(x) \quad (5.2b)$$

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.(5.1) tem-se,

$$L\left[\frac{\partial^2 Y(x, t)}{\partial t^2}\right] + L[Ry(x, t)] + L[Ny(x, t)] = L[f(x, t)] \quad (5.3)$$

Tornando-se,

$$s^2 L[Y(X, T)] - sy(x, 0) - \frac{\partial y}{\partial t}(x, 0) = -L[Ry(x, t)] - L[Ny(x, t)] + L[f(x, t)] \quad (5.4)$$

Desta forma, empregando-se as condições dadas e a inversa da transformada de Laplace,

obtém-se:

$$y(x, t) = F(x, t) - L^{-1}\left[\frac{1}{s^2}(L[Ry(x, t)] + L[Ny(x, t)]) + \frac{1}{s^2}(L[f(x, t)])\right] \quad (5.5)$$

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

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

$$y(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) \quad (5.6)$$

sendo que os termos não lineares podem ser decompostos como,

$$Ny(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} p^n H_n(y) \quad (5.7)$$

onde os termos H_n são os polinômios de He. Logo, colocando-se as Eqs.(5.6) e (5.7) em (5.5) resulta,

$$\sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) = F(x, t) - p(L^{-1}\left[\frac{1}{s^2}L\left[R\sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x, t) + R\sum_{n=0}^{\infty} p^n H_n(x, t)\right]\right]) \quad (5.8)$$

Por fim, confrontando-se os termos com potências de p surgem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} p^0 : y_0(x, t) &= F(x, t) \\ p^1 : y_1(x, t) &= \left(L^{-1}\left[\frac{1}{s^2}L[Ry_0(x, t) + H_0(y)]\right]\right) \\ p^2 : y_2(x, t) &= \left(L^{-1}\left[\frac{1}{s^2}L[Ry_1(x, t) + H_1(y)]\right]\right) \\ p^3 : y_3(x, t) &= \left(L^{-1}\left[\frac{1}{s^2}L[Ry_2(x, t) + H_2(y)]\right]\right) \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned} \quad (5.9)$$

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

$$H_n(y_0, \dots, y_n) = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial p^n} N \left(\sum_{k=0}^n p^k y_k \right)_{p=0} \quad (5.10)$$

5.2 Derivada Fracionária - Definição de Caputo

Há uma variedade de definições de derivadas de ordem fracionária. Dentre elas estão as definições de Riemann-Liouville, Caputo, Riesz, Weyl, Grunwald-Letnikov dentre outros (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:

$$D_*^\alpha = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t \frac{f^n(s) ds}{(t-s)^{\alpha+1-n}}, & n-1 < \alpha < n \\ \frac{d^n}{dt^n} f(t), & \alpha = 1 \end{cases} \quad (5.11)$$

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

5.2.1 Função de Mittag-Leffler

Dentre as funções relacionadas com o cálculo fracionário, uma das mais importantes é a função de Mittag-Leffler, a qual 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 $x > 0$ é dada por:

$$E_\alpha(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \quad (5.12)$$

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

$$E_1(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = e^x \quad (5.13)$$

A função de Mittag-Leffer de dois parâmetros, com $x \in \Re$ e $x > 0$ é dada por:

$$E_{\alpha, \phi}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + \phi)} \quad (5.14)$$

5.2.2 Transformada de Laplace da derivada de Caputo

A transformada de Laplace aplicada na derivada de Caputo necessita de condições iniciais da função, sendo fundamental o conhecimento de suas derivadas de ordem inteira, que são fisicamente interpretáveis (CAMARGO, 2009).

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

$$L[D^\alpha f(t)] = s^{\alpha-n} \left[s^n F(S) - \sum_{j=1}^n s^{n-j} f^{(j-1)}(0) \right] = s^\alpha F(S) - \sum_{j=1}^n s^{\alpha-j} f^{(j-1)}(0) \quad (5.15)$$

Para $0 < \alpha \leq 1$, a Eq.(5.15) pode ser reescrita como:

$$L[D^\alpha f(t)] = s^\alpha F(S) - s^{\alpha-1} f(0) \quad (5.16)$$

A seguir apresenta-se a solução da equação de difusão-advecção fracionária com Lei de Fick modificada usando a metodologia proposta.

5.3 Solução da equação de difusão considerando a Lei de Fick modificada

A difusão por bi-fluxo consiste no fluxo simultâneo de dois conjuntos de partículas espalhando-se com duas velocidades distintas, sendo modelada através de uma equação diferencial linear de 2ª e 4ª ordem (BEVILACQUA *et al.*, 2016):

$$\frac{\partial c}{\partial t}(z, t) = (1 - \mu) k_{z(1)} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(z, t) - \mu(1 - \mu) k_{z(2)} \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(z, t) \quad (5.17)$$

para $0 < z < h$, $t > 0$, onde h é a altura da CLP. Além disto, c é a concentração de poluentes, z é a variável espacial na direção vertical, t é o tempo, μ representa um parâmetro de controle da retenção e difusão, por simplicidade, considera-se os coeficientes de difusão $k_{z(1)}$ e $k_{z(2)}$ constantes. Para obter-se a solução da Equação (5.17) é necessário especificar as condições de contorno de fluxo nulo no topo da CLP ($z = h$): e no solo ($z = 0$):

$$k_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = h \quad (5.18)$$

$$k_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \quad (5.19)$$

Além disso, assume-se uma condição inicial com emissão de poluentes constante Q na altura da fonte:

$$c(z, 0) = Q\delta(z - H_s) \text{ em } t = 0 \quad (5.20)$$

onde $\delta(z - H_s)$ é a função delta de Dirac e H_s é a altura da fonte. Para usar a metodologia proposta neste trabalho, a função delta de Dirac deve ser aproximada pela expressão:

$$\delta(z - H_s) = \frac{1}{h} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.21)$$

onde $\lambda_n = \frac{n\pi}{h}$, são os autovalores. Portanto, a condição inicial (5.20) pode ser reescrita como:

$$c(z, 0) = \frac{Q}{h} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.22)$$

Para a solução da equação (5.17), aplica-se a transformada de Laplace na variável t , obtendo-se:

$$s\hat{c}(z, s) - c(z, 0) = L \left[(1 - \mu) k_{z(1)} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(z, t) \right] - L \left[\mu (1 - \mu) k_{z(2)} \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(z, t) \right] \quad (5.23)$$

Rearranjando, tem-se:

$$\hat{c}(z, s) = \frac{c(z, 0)}{s} + \frac{(1 - \mu) k_{z(1)}}{s} L \left[\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(z, t) \right] - \frac{\mu (1 - \mu) k_{z(2)}}{s} L \left[\frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(z, t) \right] \quad (5.24)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Equação (5.24), resulta:

$$L^{-1} [\hat{c}(z, s)] = L^{-1} \left[\frac{c(z, 0)}{s} + \frac{(1 - \mu) k_{z(1)}}{s} L \left[\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(z, t) \right] - \frac{\mu (1 - \mu) k_{z(2)}}{s} L \left[\frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(z, t) \right] \right] \quad (5.25)$$

Portanto,

$$c(z, t) = c_0 + L^{-1} \left[\frac{(1 - \mu) k_{z(1)}}{s} L \left[\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(z, t) \right] - \frac{\mu (1 - \mu) k_{z(2)}}{s} L \left[\frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(z, t) \right] \right] \quad (5.26)$$

Pelo método de homotopia, a solução geral pode ser escrita como:

$$c(z, t) = c_0 + c_1 + c_2 + c_3 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \quad (5.27)$$

onde:

$$c_0 = \frac{Q}{h} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.28)$$

Seguindo-se a metodologia, calculam-se as derivadas que serão utilizadas nos termos : $c_i (i = 0, 1, 2, 3, \dots)$.

$$c_{i+1}(z, t) = L^{-1} \left[\frac{(1 - \mu) k_{z(1)}}{s} L \left[\frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2}(z, t) \right] - \frac{\mu (1 - \mu) k_{z(2)}}{s} L \left[\frac{\partial^4 c_i}{\partial z^4}(z, t) \right] \right] \quad (5.29)$$

Cálculo de c_1 :

$$\frac{\partial c_0}{\partial z} = -\frac{2Q}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.30)$$

$$\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} = -\frac{2Q}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos n(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.31)$$

$$\frac{\partial^3 c_0}{\partial z^3} = \frac{2Q}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^3 \cos n(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.32)$$

$$\frac{\partial^4 c_0}{\partial z^4} = -\frac{2Q}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos n(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.33)$$

Por simplicidade, tomando-se em (5.29), $A_1 = (1 - \mu)k_{z(1)}$ e $A_2 = \mu(1 - \mu)k_{z(2)}$, se tem:

$$c_1 = L^{-1} \left[\frac{A_1}{s} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] - \frac{A_2}{s} L \left[\frac{\partial^4 c_0}{\partial z^4} \right] \right] = L^{-1} \left[\left[\frac{A_1}{s^2} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] - \left[\frac{A_2}{s^2} \frac{\partial^4 c_0}{\partial z^4} \right] \right] \quad (5.34)$$

Substituindo-se (5.31) e (5.33) em (5.34), obtém-se:

$$c_1 = -\frac{2QtA_1}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) - \frac{2QtA_2}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.35)$$

Logo,

$$c_1 = -\frac{2Qt}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) (A_1 + A_2 \lambda_n^2) \quad (5.36)$$

Cálculo de c_2 :

$$\frac{\partial c_1}{\partial z} = -\frac{2QtA_1}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^3 \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) + \frac{2QtA_2}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^5 \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.37)$$

$$\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} = \frac{2QtA_1}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) + \frac{2QtA_2}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^6 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.38)$$

$$\frac{\partial^3 c_1}{\partial z^3} = -\frac{2QtA_1}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^5 \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) - \frac{2QtA_2}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^7 \sin(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.39)$$

$$\frac{\partial^4 c_1}{\partial z^4} = -\frac{2QtA_1}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^6 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) - \frac{2QtA_2}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^8 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (5.40)$$

Logo,

$$c_2 = \frac{2Qt^2}{2h} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^2 \quad (5.41)$$

Portanto, agrupando-se estes primeiros, se tem:

$$c(z, t) = \frac{Q}{h} + \frac{2Q}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \left\{ 1 - t\lambda_n^2 (A_1 + A_2 \lambda_n^2) + \frac{1}{2} t^2 \lambda_n^4 (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^2 + \dots \right\} \quad (5.42)$$

De forma que a solução final é dada por:

$$c(z, t) = \frac{Q}{h} + \frac{2Q}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \exp[-t\lambda_n^2 (A_1 + A_2 \lambda_n^2)] \quad (5.43)$$

Observa-se prontamente que a equação (5.43) é a bem conhecida solução Gaussiana. Se $A_2 = 0$, obtém-se a solução para difusão tradicional.

Nesta seção foi obtida a solução da equação proposta no trabalho de (BEVILACQUA *et al.*, 2016). No entanto, para confrontar com dados experimentais é necessário a inclusão do termo advectivo u (velocidade média do vento). Logo, na próxima seção, obtém-se a solução da equação de difusão-advectação.

5.4 Solução da EDA fracionária considerando a Lei de Fick modificada

A equação fracionária proposta com o termo advectivo pode ser escrita como:

$$u \frac{\partial^\alpha c}{\partial x^\alpha}(x, z) = (1 - \mu) k_{z(1)} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) - \mu (1 - \mu) k_{z(2)} \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \quad (5.44)$$

para $0 < z < h$, $x > 0$, onde h é a altura da CLP, u é a velocidade longitudinal do vento médio e α é um parâmetro de ordem fracionária ($0 < \alpha < 1$). Além disto, c é a concentração de poluentes, z é a variável espacial na direção vertical, x é a distância longitudinal da fonte, μ representa um parâmetro de controle da retenção e difusão e, por simplicidade, consideram-se os coeficientes de difusão $k_{z(1)}$ e $k_{z(2)}$ constantes. Para obter-se a solução da equação (5.44) é necessário especificar as condições de contorno:

$$k_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = h \quad (5.45)$$

$$k_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \quad (5.46)$$

Além disso, assume uma condição de fonte com emissão de poluentes constante Q na altura da fonte:

$$uc(0, z) = Q\delta(z - H_s) \text{ em } x = 0 \quad (5.47)$$

onde $\delta(z - H_s)$ é a função delta de Dirac e H_s é a altura da fonte. Para usar a metodologia proposta neste trabalho, a função delta de Dirac deve ser aproximada pela expressão:

$$\delta(z - H_s) = \frac{1}{h} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.48)$$

onde $\lambda_n = \frac{n\pi}{h}$, são os autovalores. Portanto, a condição de fonte (5.47) pode ser reescrita como:

$$c(0, z) = \frac{Q}{uh} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.49)$$

Para a solução da equação (5.44), aplica-se a transformada de Laplace na variável x , usando a definição da derivada de Caputo, obtendo-se:

$$us^\alpha \hat{c}(s, z) - us^{\alpha-1} c(0, z) = L \left[(1 - \mu) k_{z(1)} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - L \left[\mu (1 - \mu) k_{z(2)} \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \quad (5.50)$$

onde L representa a transformada de Laplace. Rearranjando-se a equação (5.50), obtém-se:

$$\hat{c}(s, z) = \frac{c(0, z)}{s} + \frac{(1 - \mu) k_{z(1)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\mu (1 - \mu) k_{z(2)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \quad (5.51)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Equação (5.51), resulta:

$$L^{-1} [\hat{c}(s, z)] = L^{-1} \left[\frac{c(0, z)}{s} + \frac{(1 - \mu) k_{z(1)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\mu (1 - \mu) k_{z(2)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \right] \quad (5.52)$$

Portanto,

$$c(x, z) = c_0 + L^{-1} \left[\frac{(1 - \mu) k_{z(1)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\mu (1 - \mu) k_{z(2)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \right] \quad (5.53)$$

Pelo método da homotopia, a solução geral pode ser escrita como:

$$c(x, z) = c_0 + c_1 + c_2 + c_3 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \quad (5.54)$$

onde:

$$c_0 = \frac{Q}{uh} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5.55)$$

e os demais termos:

$$c_{i+1}(x, z) = L^{-1} \left[\frac{(1-\mu)k_{z(1)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\mu(1-\mu)k_{z(2)}}{us^\alpha} L \left[\frac{\partial^4 c_i}{\partial z^4}(x, z) \right] \right], i = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5.56)$$

Seguindo-se a metodologia, calculam-se as derivadas que serão utilizadas nos termos c_i . Por simplicidade, tomando-se em (5.56), $A_1 = (1-\mu)k_{z(1)}$ e $A_2 = \mu(1-\mu)k_{z(2)}$, resulta :

$$c_1 = \frac{2Q}{uh} \frac{x^\alpha}{u\Gamma(\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) (A_1 + A_2 \lambda_n^2) \quad (5.57)$$

$$c_2 = \frac{2Q}{uh} \frac{x^{2\alpha}}{2! u^2 \Gamma(2\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^2 \quad (5.58)$$

$$c_3 = \frac{2Q}{uh} \frac{x^{3\alpha}}{3! u^3 \Gamma(3\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^6 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^3 \quad (5.59)$$

onde Γ é a função Gamma. Portanto, agrupando-se estes primeiros termos, tem-se:

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

$$\left\{ 1 - \frac{x^\alpha}{u\Gamma(\alpha+1)} \lambda_n^2 (A_1 + A_2 \lambda_n^2) + \frac{1}{2!} \frac{x^{2\alpha}}{u^2 \Gamma(2\alpha+1)} \lambda_n^4 (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^2 + \frac{1}{3!} \frac{x^{3\alpha}}{u^3 \Gamma(3\alpha+1)} \lambda_n^6 (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^3 + \dots \right\} \quad (5.60)$$

Portanto, a solução final é dada por:

$$c(x, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_{\alpha} \left[\frac{-x^{\alpha}}{u} \lambda_n^2 (A_1 + A_2 \lambda_n^2) \right] \quad (5.61)$$

Segue que a equação (5.61) é mais geral, no sentido que, se $A_2 = 0$ e $\alpha = 1$, obtém-se a solução para a equação de difusão-advectação normal. Cabe ressaltar que E_{α} é a função de Mittag-Leffler, a qual é intrínseca às soluções com derivadas fracionárias.

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, utiliza-se um coeficiente de difusão turbulenta válidos na CLP diurna (CLC), sendo representado pela Eq.(5.62). Este coeficiente de difusão turbulento é dependente somente da variável z e foi deduzido para condições instáveis (DEGRAZIA; VELHO; CARVALHO, 1997):

$$k_z = 0.22w_* h \left(\frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-4\frac{z}{h}\right) - 0.0003\exp\left(8\frac{z}{h}\right)\right] \quad (5.62)$$

onde w_* é a velocidade convectiva, z é a variável espacial na direção vertical. Ressalta-se que é feita uma média deste coeficiente na variável z , obtendo-se assim um coeficiente constante.

Validação do modelo

Para analisar a performance do modelo, compara-se os dados simulados (utilizando o *software* MATHEMATICA) com os dados obtidos no experimento de Copenhagen.

6.1 Resultados

6.1.1 Experimento de Copenhagen

Nos experimentos de dispersão em Copenhagen, 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).

Os parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen são mostrados na Tabela 6.1, onde L_{MO} é o comprimento de Monin – Obukhov (m), h é a altura da camada limite convectiva (m), u_* é a velocidade de fricção (m/s), w_* é a escala de velocidade convectiva (m/s), u_z é a velocidade do vento médio (m/s) medido a 10 e 115 m e x é a distância longitudinal da fonte m .

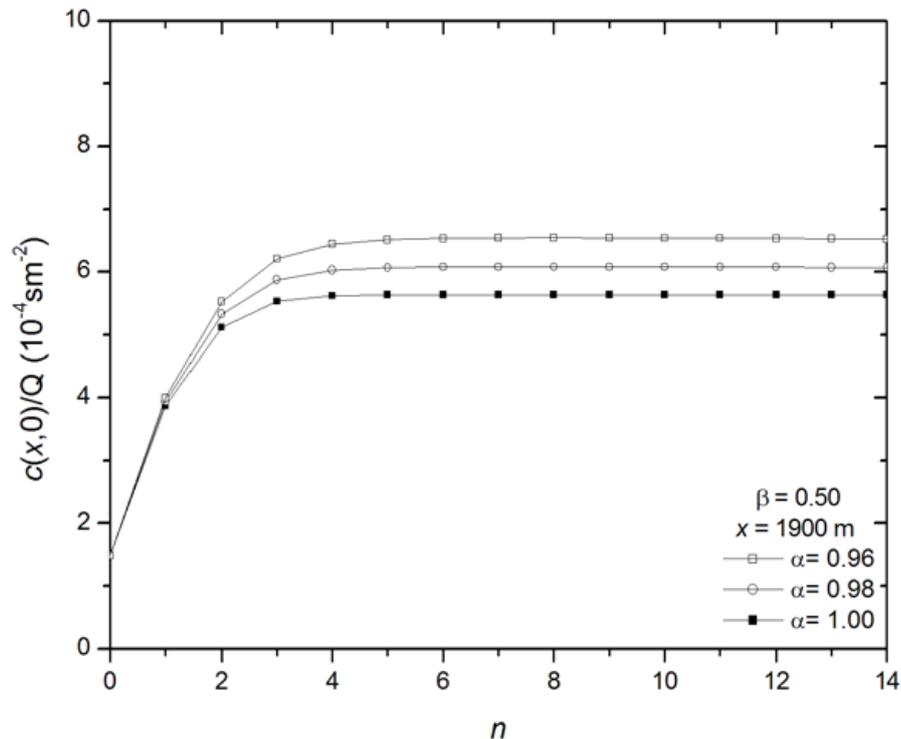
A Tabela 6.1 apresenta os dados meteorológicos, em médias horárias, dos experimentos de dispersão de Copenhagen que foram utilizados como parâmetros de entrada no modelo.

Tabela 6.1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagem

EXP	$u_{z(115)}$ (m/s)	$u_{z(10)}$ (m/s)	h (m)	L_{Mo} (m)	u_* (m)	w_* (ms^{-1})	x (m)
1	3.4	2.1	1980	-37	0.36	1.8	1900
1	3.4	2.1	1980	-37	0.36	1.8	3700
2	10.6	4.9	1920	-292	0.73	1.8	2100
2	10.6	4.9	1920	-292	0.73	1.8	4200
3	5.0	2.4	1120	-71	0.38	1.3	1900
3	5.0	2.4	1120	-71	0.38	1.3	3700
3	5.0	2.4	1120	-71	0.38	1.3	5400
4	4.6	2.5	390	-133	0.38	0.7	4000
5	6.7	3.1	820	-444	0.45	0.7	2100
5	6.7	3.1	820	-444	0.45	0.7	4200
5	6.7	3.1	820	-444	0.45	0.7	6100
6	13.2	7.2	1300	-432	1.05	2.0	2000
6	13.2	7.2	1300	-432	1.05	2.0	4200
6	13.2	7.2	1300	-432	1.05	2.0	5900
7	7.6	4.1	1850	-104	0.64	2.2	2000
7	7.6	4.1	1850	-104	0.64	2.2	4100
7	7.6	4.1	1850	-104	0.64	2.2	5300
8	9.4	4.2	810	-56	0.69	2.2	1900
8	9.4	4.2	810	-56	0.69	2.2	3600
8	9.4	4.2	810	-56	0.69	2.2	5300
9	10.5	5.1	2090	-289	0.75	1.9	2100
9	10.5	5.1	2090	-289	0.75	1.9	4200
9	10.5	5.1	2090	-289	0.75	1.9	6000

A Figura 6.1 mostra a proposta da solução da equação difusão-advecção 2D de ordem fracionária é uma solução em série, um teste de convergência em série é apropriado. Para este teste, usamos dados meteorológicos do experimento 1 de Copenhagem. A Figura 1 mostra a convergência numérica da solução proposta para a concentração no nível do solo a uma distância de 1900 m em função do número de termos n (solução MDL) considerando a velocidade do vento U_{115} (medida na altura da fonte), parâmetro de retenção e valores diferentes do parâmetro fracionário (0,96, 0,98 e 1,00).

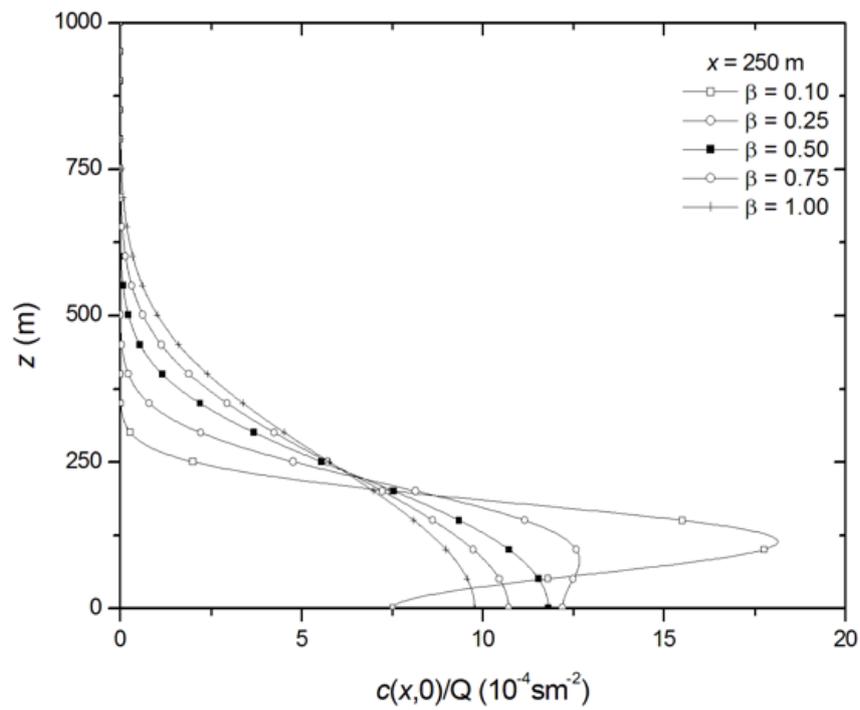
Figura 6.1: Teste de convergência do modelo com $\beta = 0.50$ e valores diferentes de α (0.96, 0.98 e 1.00) .



Fonte: Autoria própria, 2018.

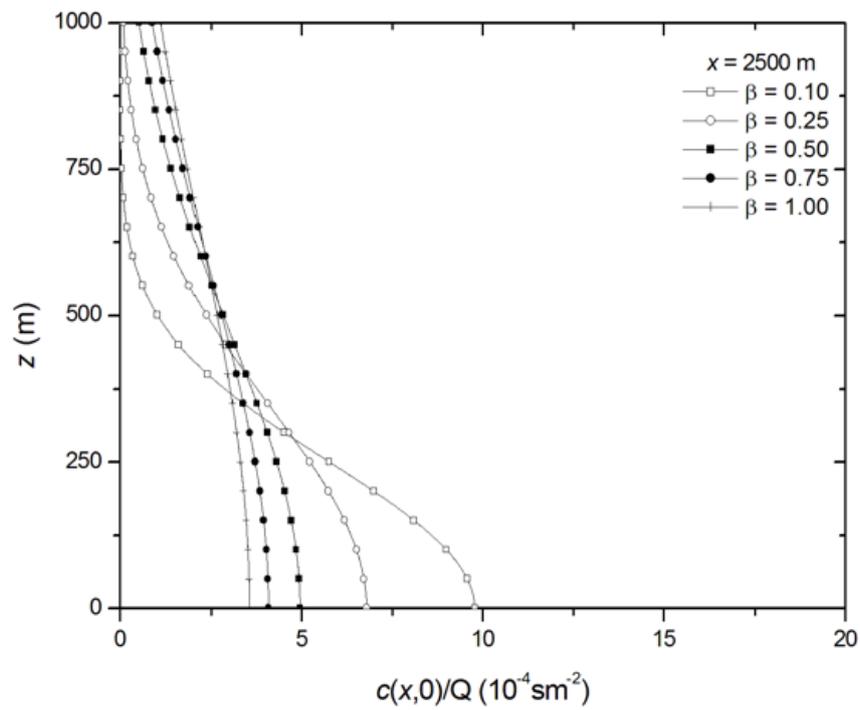
A figura 6.1 mostra que a solução converge mais rápido à medida que o número de termos da soma (n) aumenta, mesmo para valores diferentes do parâmetro fracionário α . A uma distância de 1900 m, uma diminuição em α aumenta a concentração. A figura 6.2 e 6.3 mostram os resultados dos testes de sensibilidade para verificar a influência do termo de quarta ordem, mas apenas com um parâmetro fracionário de ordem inteira ($\alpha = 1.00$). O perfil vertical da concentração integrada de vento cruzado a distâncias de 250 m e 2500 m da fonte são apresentados para vários valores de β (0,10, 0,25, 0,50, 0,75 e 1,00). As simulações usaram um valor médio para K_{z1} dado pela Eq. ((5.62)) e $K_{z2} = 1 \text{ m}^4/\text{s}$.

Figura 6.2: Perfil vertical de concentração integrada de vento cruzado para distâncias de 250 m da fonte em função de β (0,10, 0,25, 0,50, 0,75 e 1,00).



Fonte: Autoria própria, 2018.

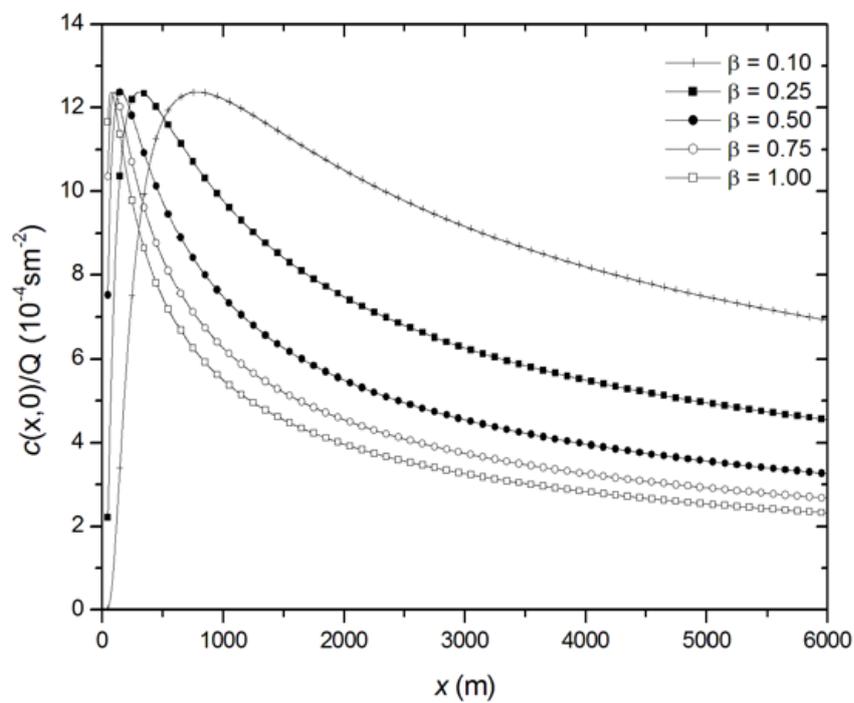
Figura 6.3: Perfil vertical de concentração integrada de vento cruzado para distâncias de 2500 m da fonte em função de β (0,10, 0,25, 0,50, 0,75 e 1,00).



Fonte: Autoria própria, 2018.

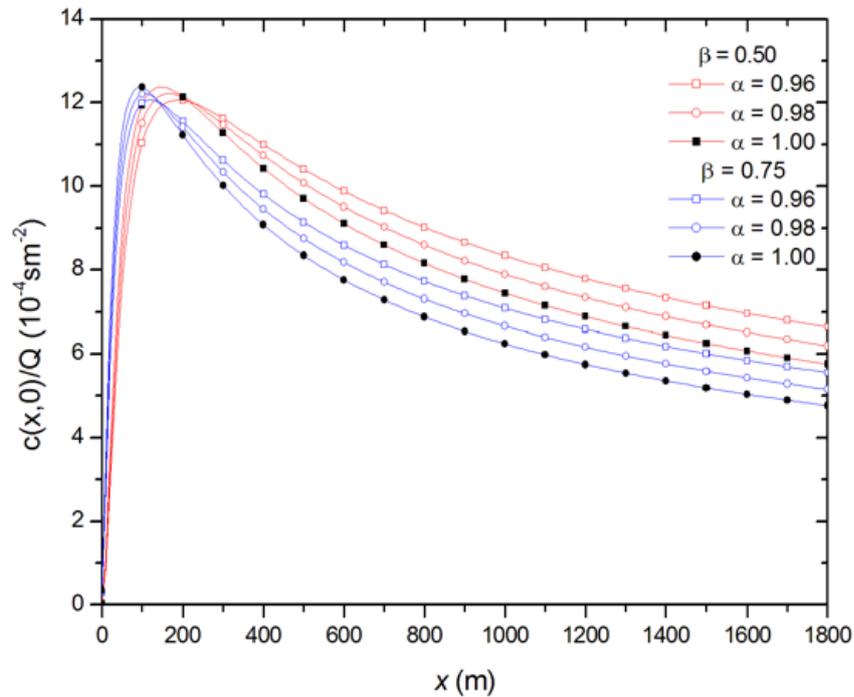
Na Figura 6.2, que representa uma distância de 250 m, uma diminuição no parâmetro produz um aumento na concentração na região da altura da fonte. A figura 6.3, que representa uma distância de 2.500 m, exibe um efeito similar, mas com uma maior homogeneização da concentração na direção vertical. O parâmetro controla efetivamente o efeito difusivo da dispersão de poluentes na atmosfera. A figura 6.4 e 6.5 mostra a concentração integrada do vento cruzado como uma função da distância da fonte para vários valores de α e β .

Figura 6.4: Concentração integrada ao vento de nível do solo em função da distância da fonte: a) $\alpha = 1,00$ e $\beta = 0,10, 0,25, 0,50, 0,75$ e $1,00$.



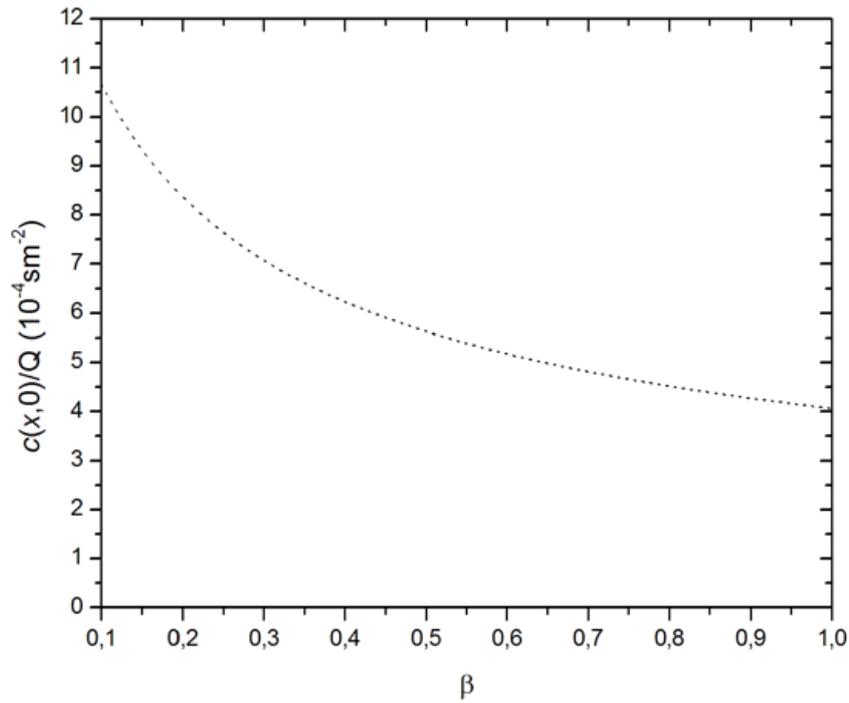
Fonte: Autoria própria, 2018.

Figura 6.5: Concentração integrada de nível cruzado no nível do solo em função da distância da fonte $\alpha = 0,96, 0,98$ e $1,00$ e $\beta = 0,5, 0,75$.



Fonte: Autoria própria, 2018.

A figura 6.4 mostra que, diminuindo o valor de β , o pico de concentração pode ser deslocado para distâncias maiores da fonte, mas o valor da concentração de pico não muda. No entanto, na Figura 6.5, podemos ver uma ligeira diminuição na concentração de pico quando α diminui, mas o nível de concentração mais longe da fonte aumenta. Isso é mais pronunciado no valor mais baixo de β . É importante demonstrar a influência do parâmetro β na concentração no nível do solo. Este efeito é mostrado na Figura 6.6.

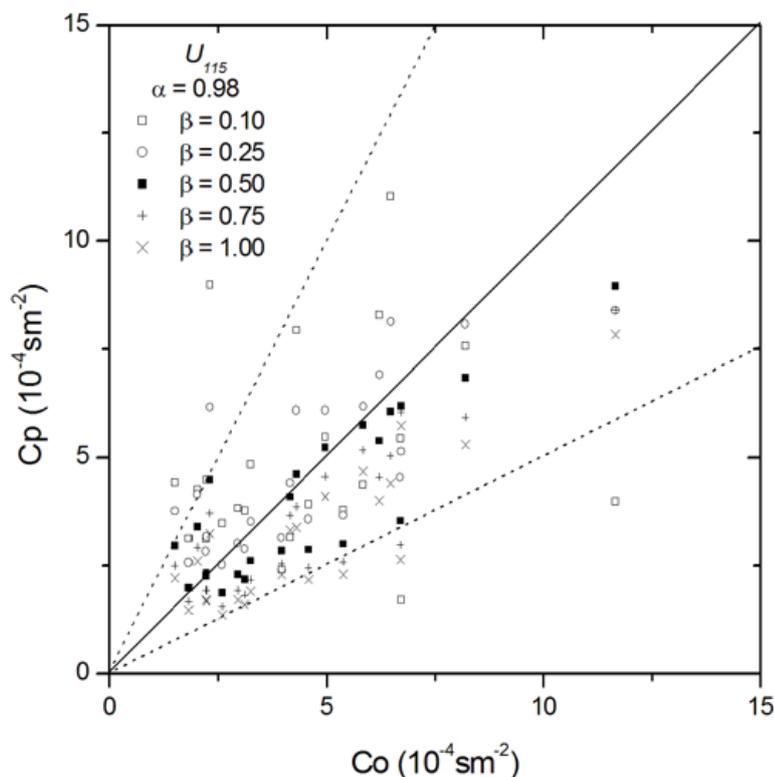
Figura 6.6: Concentração no nível do solo em função de β .

Fonte:

Autoria própria, 2018.

É claramente aparente que o β efetivamente influencia a concentração integrada pelo vento cruzado no nível do solo. Portanto, a fração β é um parâmetro de controle para a intensidade do fluxo secundário. As concentrações observadas são comparadas com as de simulações com velocidade do vento U_{115} e $\alpha = 0.98$ para vários β na Figura 5

Figura 6.7: Diagrama de dispersão observado e previsto das concentrações no nível do solo com $\alpha = 0,98$ e U_{115} para valores diferentes de β (0,10, 0,25, 0,50, 0,75 e 1,00). Linhas pontilhadas indicam um fator de dois.



Fonte: Autoria própria, 2018.

A concentração integrada de vento cruzado com coeficiente de difusão turbulento constante modelada sob as condições moderadamente instáveis do experimento de Copenhagen é muito bem representada usando $\beta = 0.50$, com todos os pontos de dados entre as linhas pontilhadas (representando um fator de dois). A análise a seguir é uma avaliação estatística das simulações do modelo em comparação com os dados 2D experimentais dos experimentos de Copenhagen. O objetivo é verificar a influência do parâmetro fracionário (α) e do termo de retenção (β) e comparar nossos resultados com os de outros modelos. O desempenho do modelo é avaliado estatisticamente usando o procedimento descrito por (HANNA; PAINE, 1989) e as seguintes métricas:

Os índices estão descritos a seguir: o e p indicam as quantidades observadas e previstas, respectivamente, \bar{C} é a concentração de poluente e σ é o desvio.

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

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

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):

$$Fb = \frac{\overline{C_0} - \overline{C_P}}{0,5(\overline{C_0} - \overline{C_P})}$$

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 (Fs):

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

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 $0.5 \leq (C_p/C_o) \leq 2$. Quanto mais próximo de 1 estiver este valor, maior é a confiabilidade do modelo.

5. Coeficiente de Correlação (Cor): definido como

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

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.

Onde os índices o e p se referem às quantidades observadas e previstas, respectivamente, e um overbar indica um valor médio. O índice estatístico FB reflete se as quantidades esperadas subestimam ou superestimam os valores observados. O índice estatístico NMSE representa a dispersão da saída do modelo em relação à dispersão de dados. Espera-se que

os melhores resultados forneçam valores próximos de zero para os índices NMSE, FB e FS, e próximos de 1 para os índices COR e FAT2. Observe que o experimento de Copenhague fornece dados de velocidade do vento em duas alturas distintas: 10 m (U_{10}) e 115 m (U_{115}). Portanto, é possível analisar a solução obtida neste trabalho e a influência da altura das medidas de velocidade do vento no processo de dispersão. As tabelas 6.2 e 6.3 apresentam os resultados estatísticos do modelo representado por (5.61) para diferentes valores de α e β e para a velocidade do vento medida em alturas de 10 m e 115 m.

Além disso, apresentamos os resultados fornecidos por outros modelos: Modelo 2 refere-se à metodologia ADMM (Técnica Multicamada Advecção-Difusão) com coeficiente de difusão parasitas dependentes de x e z (turbulência não homogênea na direção vertical), mas usando um coeficiente de difusão média turbulenta em a direção x (COSTA, 2007) e uma velocidade do vento U com um perfil semelhante; O modelo 3 refere-se à metodologia GILTT (Técnica Integral de Transformação de Laplace generalizada) (MOREIRA *et al.*, 2009), também com coeficiente de difusão de vórtice dependente da direção vertical z , mas com um perfil de velocidade do vento U dado por uma lei de potência.

Tabela 6.2: Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Copenhague para $u_{z(115)}$

Modelo 1		NMSE	COR	FAT2	FB	FS
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.10$	0.32	0.32	0.78	-0.11	0.12
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.25$	0.10	0.81	0.91	-0.03	0.24
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.50$	0.12	0.87	0.96	0.17	0.28
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.75$	0.21	0.87	0.96	0.17	0.28
$\alpha = 1.00$	$\beta = 1.00$	0.32	0.87	0.78	0.43	0.43
Modelo 2	ADMM (COSTA, 2007)	0.06	0.89	1.000	0.02	0.09
Modelo 3	GILTT (MOREIRA <i>et al.</i> , 2009)	0.09	0.85	1.000	0.11	0.13
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.10$	0.36	0.26	0.78	0.11	0.10
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.25$	0.10	0.79	0.87	0.04	0.25
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.50$	0.11	0.86	1.000	0.14	0.27
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.75$	0.18	0.87	0.91	0.28	0.34
$\alpha = 0.99$	$\beta = 1.00$	0.28	0.87	0.83	0.39	0.41
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.10$	0.40	0.20	0.74	0.09	0.06
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.25$	0.12	0.76	0.87	0.05	0.25
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.50$	0.10	0.86	1.000	0.12	0.27
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.75$	0.17	0.87	0.91	0.25	0.33
$\alpha = 0.98$	$\beta = 1.00$	0.25	0.87	0.87	0.36	0.40

Tabela 6.3: Resultados dos índices estatísticos para o Experimento de Copenhagen para $u_{z(10)}$.

Modelo 1		<i>NMSE</i>	<i>COR</i>	<i>FAT2</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.10$	0.76	0.73	0.30	-0.73	-0.41
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.25$	0.40	0.84	0.65	-0.52	-0.40
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.50$	0.17	0.85	0.87	-0.27	-0.25
$\alpha = 1.00$	$\beta = 0.75$	0.10	0.85	0.91	-0.09	-0.12
$\alpha = 1.00$	$\beta = 1.00$	0.09	0.85	0.96	0.04	-0.03
Modelo 2	ADMM (COSTA, 2007)	0.06	0.89	1.000	0.02	0.09
Modelo 3	GILTT (MOREIRA <i>et al.</i> , 2009)	0.09	0.85	1.000	0.11	0.13
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.10$	0.79	0.69	0.30	-0.74	-0.40
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.25$	0.43	0.84	0.65	-0.54	-0.40
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.50$	0.19	0.85	0.89	-0.29	-0.27
$\alpha = 0.99$	$\beta = 0.75$	0.11	0.85	0.91	-0.13	-0.14
$\alpha = 0.99$	$\beta = 1.00$	0.09	0.85	0.96	0.00	-0.05
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.10$	0.81	0.65	0.26	-0.75	-0.39
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.25$	0.46	0.84	0.61	-0.56	-0.40
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.50$	0.22	0.85	0.87	-0.33	-0.28
$\alpha = 0.98$	$\beta = 0.75$	0.12	0.85	0.87	-0.16	-0.17
$\alpha = 0.98$	$\beta = 1.00$	0.09	0.85	0.91	-0.04	-0.08

Em relação ao modelo proposto neste trabalho, a Tabela 6.2 e 6.3 indica que o melhor resultado em comparação com os outros modelos é obtido com valores de parâmetros de $\alpha = 0.98$, $\beta = 0.50$, e velocidade do vento U115, já que dá o menor valor de NMSE (0,10) e FAT2 de 100% é igual a (1,00). O resultado com $\alpha = 0.99$ e $\beta = 0.50$ é muito similar. O pior resultado ocorre com $\alpha = 0,98$ e a velocidade do vento U10, pois tem o maior NMSE (0,81) e o menor FAT2 (0,26). O fato de os parâmetros físicos não dependerem explicitamente da variável z , que é influenciada pela superfície da Terra, não afeta a metodologia proposta, pois essa falta de turbulência não homogênea na direção vertical é compensada de alguma forma pela variação de α e β . Isto é confirmado pela comparação entre o modelo proposto e os resultados dos Modelos 2 e 3 (ADMM e GILTT, respectivamente), que consideram a falta de homogeneidade na direção vertical e são modelos mais complexos em relação ao seu desenvolvimento e implementação computacional. O modelo proposto neste estudo é mais simples e fácil de implementar e permite a análise explícita de seus parâmetros físicos devido às suas características analíticas.

Conclusão

A presente pesquisa obteve uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária com a Lei de Fick modificada através do método da decomposição por Laplace (HE *et al.*, 2008) e comparou os resultados simulados com dados experimentais da literatura.

Para obter essa solução, o MDL e o fechamento de fluxo duplo foram aplicados simultaneamente e combinados com o conceito de derivadas fracionárias. Mostramos que o efeito de memória, que normalmente só é considerado quando coeficiente de difusão é dependente da distância da fonte, é vital tanto para o fechamento da turbulência quanto para os derivados fracionários. Este é um resultado interessante, porque os problemas de dispersão na atmosfera geralmente levam em conta apenas o efeito de memória para o coeficiente de difusão turbulenta.

Os melhores resultados de simulação para o experimento de Copenhagen, em comparação com os outros modelos, foram obtidos com $\alpha = 0,95$, $\beta = 0,50$, e velocidade do vento U_{115} . Estes parâmetros deram o menor NMSE (0,10) e o máximo FAT2 de 100% (1,00). No entanto, simulações com $\alpha = 0,99$ e $\beta = 0,50$ deram resultados muito semelhantes. O pior resultado ocorreu com $\alpha = 0,98$ e velocidade do vento U_{10} , dando o maior NMSE (0,81) e o menor FAT2 (0,26).

O fato de os parâmetros físicos do modelo (coeficiente difusão e velocidade do vento) não dependerem explicitamente da variável z , que é influenciada pela superfície da Terra, não afeta a metodologia proposta, pois essa falta de turbulência não homogênea na direção vertical é de alguma forma compensado pela variação de e . Isto é confirmado pela comparação entre o modelo proposto em nosso estudo e os resultados de ADMM e GILTT, que consideram a não homogeneidade na direção vertical e são modelos mais complexos. O modelo proposto neste trabalho é mais simples e fácil de implementar, e permite a análise explícita de seus parâmetros físicos devido às suas características analíticas. Em termos práticos, verificamos que não houve vantagem em utilizar uma difusão turbulenta que é dependente de x e z simultaneamente no processo de dispersão, considerando as condições meteorológicas do experimento de Copenhagen.

Este trabalho é um passo para resolver a equação difusão-advecção com parâmetros fracionários nos termos difusivos e turbulência não homogênea na direção vertical. Isso é um desafio, mas nossos resultados mostram que os novos modelos devem levar em conta os aspectos fundamentais da modelagem fracionária como uma generalização dos cálculos que conhecemos atualmente.

Neste contexto, ficou enfatizado que, para situações mais complexas de dispersão de poluentes na atmosfera deve-se recorrer a modelos numéricos. Entretanto, as soluções analíticas são sempre necessárias para uma rápida análise, além de serem fáceis de gerenciar as principais variáveis 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 difusão-advecção obtida representa uma poderosa ferramenta para calcular o campo de concentração de poluentes, permitindo uma melhor compreensão do processo de dispersão com menor esforço computacional devido à característica analítica do modelo. No entanto, futuramente a solução aqui obtida poderá ser testada em outros experimentos da literatura, com particular atenção às distâncias mais próximas da fonte. Logicamente, outros problemas físicos poderão ter uma influência mais significativa.

Por fim, convém mencionar que no âmbito deste trabalho, a metodologia MDL combinado com perturbação por homotopia apresentou uma solução simples e direta apresentando convergências com poucas interações, a partir da décima interação é notória convergência do modelo. A avaliação do índice estatístico desse modelo apresentou melhor resultado quando essa metodologia foi combinada com derivadas fracionárias, ou seja, seu fator de 2, coeficiente de correlação e seu erro quadrático médio apresentaram um bom desempenho conforme expresso no trabalho.

Findo esta dissertação ciente das contribuições que a mesma traz para este lócus de pesquisa que envolve uma solução analítica para a equação de difusão-advecção considerando o modelo evolutivo bi-fluxo, combinando o método de decomposição de Laplace com derivadas fracionárias e sua aplicação em problemas de dispersão de poluentes atmosféricos.

Referências Bibliográficas

- ADOMIAN, George. A review of the decomposition method in applied mathematics. *Journal of mathematical analysis and applications*, Academic Press, v. 135, n. 2, p. 501–544, 1988.
- ADOMIAN, G. *Solving frontier problems of physics: the decomposition method*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 60.
- ALBANI, Roseane AS; DUDA, Fernando P; PIMENTEL, Luiz Cláudio G. On the modeling of atmospheric pollutant dispersion during a diurnal cycle: A finite element study. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 118, p. 19–27, 2015.
- ARYA, S Pal. A review of the theoretical bases of short-range atmospheric dispersion and air quality models. *PROCEEDINGS-INDIAN NATIONAL SCIENCE ACADEMY PART A*, INDIAN NATIONAL SCIENCE ACADEMY, v. 69, n. 6, p. 709–724, 2003.
- ARYA, S Pal *et al.* *Air pollution meteorology and dispersion*. [S.l.]: Oxford University Press New York, 1999. v. 310.
- BERYAND, ME. *Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere*. [S.l.]: Translated for NERC-Library, EPA, from the original Russian by Leo Kanner Associates, 1976.
- BEVILACQUA, Luiz *et al.* A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 35, n. 4, p. 431–440, 2013.
- BEVILACQUA, Luiz; GALEÃO, Augusto CNR; COSTA, Flavio P. On the significance of higher order differential terms in diffusion processes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, SciELO Brasil, v. 33, n. 2, p. 166–175, 2011.
- BEVILACQUA, L *et al.* An evolutionary model of bi-flux diffusion processes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 38, n. 5, p. 1421–1432, 2016.
- BULIGON, Lidiane. Solução da equação de difusão unidimensional transiente para o estudo da dispersão de poluentes na camada limite planetária. 2004.
- BUSKE, Daniela. Solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método gillt aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos. 2004.
- BUSKE, D *et al.* An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. *Environmental Fluid Mechanics*, Springer, v. 7, n. 1, p. 43–54, 2007.
- CAMARGO, RF. *Cálculo Fracionário e Aplicações, 2009. 135 f.* Tese (Doutorado) — Tese (Doutorado em Matemática). Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2009.

- COSTA, Camila P *et al.* Aplicação do método geadmt na dispersão de poluentes sob condição de vento fraco. *Ciência e Natura*, Universidade Federal de Santa Maria-Centro de Ciências Naturais e Exatas, v. 31, p. 17, 2009.
- COSTA, Camila P; MOREIRA, Davidson M; VILHENA, Marco T. Influência de efeitos nao-locais na dispersao de poluentes na camada limite convectiva. In: *Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia*. [S.l.: s.n.], 2004.
- COSTA, Camila Pinto da. Simulação da dispersão de poluentes através da solução da equação de difusão-advecção tridimensional transiente pela técnica geadmt. 2007.
- COTTA, Renato Machado. *Integral transforms in computational heat and fluid flow*. [S.l.]: CRC Press, 1993.
- DEBNATH, Lokenath. Recent applications of fractional calculus to science and engineering. *International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences*, Hindawi, v. 2003, n. 54, p. 3413–3442, 2003.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- GUERRERO, JS Perez *et al.* A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 55, p. 201–212, 2012.
- HANNA, Steven R; PAINE, Robert J. Hybrid plume dispersion model (hpdm) development and evaluation. *Journal of Applied Meteorology*, v. 28, n. 3, p. 206–224, 1989.
- HE, J.H. A simple perturbation approach to blasius equation. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 140, n. 2, p. 217–222, 2003.
- HE, JH. Homotopy perturbation method for solving boundary value problems. *Physics letters A*, Elsevier, v. 350, n. 1, p. 87–88, 2006.

HE, Ji-Huan. Homotopy perturbation technique. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, North-Holland, v. 178, n. 3-4, p. 257–262, 1999.

_____. Addendum: new interpretation of homotopy perturbation method. *International journal of modern physics B*, World Scientific, v. 20, n. 18, p. 2561–2568, 2006.

_____. An elementary introduction to the homotopy perturbation method. *Computers and Mathematics with Applications*, Citeseer, v. 57, n. 3, p. 410–412, 2009.

HE, Ji-Huan *et al.* Recent development of the homotopy perturbation method. *Topological methods in nonlinear analysis*, Julius P. Schauder Centre for Nonlinear Studies, v. 31, n. 2, p. 205–209, 2008.

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.

KOCH, Wolfgang. A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 23, n. 8, p. 1729–1732, 1989.

KUMAR, Naveen; BASU, SK. Diffusive processes and modelling: An introduction. In: *Modelling and Simulation of Diffusive Processes*. [S.l.]: Springer, 2014. p. 1–25.

LIN, Jin-Sheng; HILDEMANN, Lynn M. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 31, n. 1, p. 59–71, 1997.

MANGIA, C *et al.* Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 36, n. 1, p. 67–76, 2002.

MIKHAILOV, Mikhail Dimitrov; OZISIK, M Necati. Unified analysis and solutions of heat and mass diffusion. 1984.

MOREIRA, Davidson; MORET, Marcelo. A new direction in the atmospheric pollutant dispersion inside the planetary boundary layer. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, v. 57, n. 1, p. 185–192, 2018.

MOREIRA, Davidson; TIRABASSI, Tiziano. Modelo matematico de dispersao de poluentes na atmosfera: um instrumento tecnico para a gestao ambiental. *Ambiente & sociedade*, Associacao Nacional de Pos-Graduacao e Pesquisa em Ambiente e Sociedade, v. 7, n. 2, 2004.

MOREIRA, DM *et al.* The state-of-art of the gillt method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. *Atmospheric Research*, Elsevier, v. 92, n. 1, p. 1–17, 2009.

MOREIRA, Davidson M; CARVALHO, Jonas da C; VILHENA, Marco T. Modelagem matemática da dispersão de poluentes atmosféricos: o modelo admm. *Porto Alegre: Editora da UFRGS, 1ª Edição*, 2005.

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 M *et al.* Analytical solution of the advection–diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion. *Environmental Modelling & Software*, Elsevier, v. 20, n. 10, p. 1347–1351, 2005.
- MOURA, Angela Beatrice Dewes. Solução analítica para dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável. 1995.
- NIEUWSTADT, FTM; HAAN, BJ De. An analytic solution of the one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 15, n. 5, p. 845–851, 1981.
- 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.
- NIGMATULLIN, RR. The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry. *Physica status solidi. B. Basic research*, Basic research, v. 133, p. 425–430, 1986.
- OLDHAM, Keith; SPANIER, Jerome. *The fractional calculus theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order*. [S.l.]: Elsevier, 1974. v. 111.
- PANOFSKY, Hans A; DUTTON, John A. *Atmospheric turbulence: models and methods for engineering applications*. [S.l.], 1984.
- PASQUILL, F; SMITH, FB. Atmospheric diffusion.: Study of the dispersion of windborne material from industrial and other sources. *JOHN WILEY & SONS, 605 THIRD AVE., NEW YORK, NY 10016, USA. 1983.*, 1983.
- PIRES, C. *Um estudo analítico de dispersão de contaminantes abandonados por fontes aéreas em uma camada limite convectiva*. Tese (Doutorado) — Dissertação de mestrado, Curso de Pós Graduação em Sensoreamento Remoto, 1996.
- 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.
- RUI, Karine; COSTA, Camila Pinto da. Solução da equação de advecção-difusão tridimensional pelo método geadmt para dois termos de contragradiente. *Ciência e Natura*, Universidade Federal de Santa Maria, v. 38, 2016.
- SCRIVEN, RA; FISHER, BEA. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout—ii. the effect of turbulent diffusion. *Atmospheric Environment (1967)*, Elsevier, v. 9, n. 1, p. 59–68, 1975.

- 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.
- STULL, Roland B. *An introduction to boundary layer meteorology*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 13.
- TIRABASSI, T. Analytical air pollution advection and diffusion models. *Water, Air, & Soil Pollution*, Springer, v. 47, n. 1, p. 19–24, 1989.
- TIRABASSI, T; RIZZA, U. An analytical model for a screen evaluation of the environmental impact from a single point source. *Il Nuovo Cimento C*, Springer, v. 15, n. 2, p. 181–190, 1992.
- TIRABASSI, T; TAGLIAZUCCA, M; GALLIANI, G. Easy to use air pollution model for turbulent shear flow. *Environmental Software*, Elsevier, v. 2, n. 1, p. 37–44, 1987.
- TIRABASSI, T; TAGLIAZUCCA, M; ZANNETTI, P. Kappa-g, a non-gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements. *Journal of the Air Pollution Control Association*, Taylor & Francis, v. 36, n. 5, p. 592–596, 1986.
- TIRABASSI T; RIZZA, U. A practical model for the dispersion of skewed puffs. *Journal of Applied Meteorology*, v. 34, n. 4, p. 989–993, 1995.
- TIRABASSI, U Rizza T. Applied dispersion modelling for ground-level concentrations from elevated sources. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 28, n. 4, p. 611–615, 1994.
- 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.
- VILHENA, MT *et al.* A semi-analytical solution for the three-dimensional advection–diffusion equation considering non-local turbulence closure. *Atmospheric Research*, Elsevier, v. 90, n. 1, p. 63–69, 2008.
- WANG, Yu-Xi; SI, Hua-You; MO, Lu-Feng. Homotopy perturbation method for solving reaction-diffusion equations. *Mathematical Problems in Engineering*, Hindawi, 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.
- 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.
- WORTMANN, Sérgio; MOURA, A; VILHENA, MT. Solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável. *Anais ENCIT*, 2000.
- WORTMANN, S *et al.* A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the pbl. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 39, n. 12, p. 2171–2178, 2005.

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.

ZANNETTI, P. Air pollution modelling, southampton. *Comp. Mech. Publications, UK*, 1990.