

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

**MODELO DE DISPERSÃO DE CONTAMINANTES NA
CAMADA LIMITE PLANETÁRIA USANDO DERIVADA DE
HAUSDORFF**

por

Rosaura Dias de Macedo

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Modelagem Computacional

Rio Grande, Junho, 2019

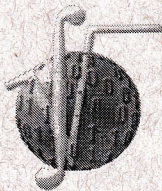
Ficha catalográfica

M141m Macedo, Rosaura Dias de.
Modelo de dispersão de contaminantes na camada limite planetária usando derivada de Hausdorff / Rosaura Dias de Macedo. – 2019.
81 f.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Rio Grande/RS, 2019.
Orientador: Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart.
Coorientador: Dr. Matheus Jatkoske Lazo.

1. Dispersão de Contaminantes 2. Derivada de Hausdorff
3. Fluxo de Concentração I. Goulart, Antonio Gledson de Oliveira
II. Lazo, Matheus Jatkoske III. Título.

CDU 531.753-382




ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

ATA Nº 12/2019

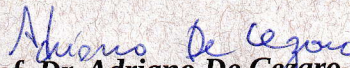
Ao vigésimo sexto dia do mês de junho, na sala 6105 – Pavilhão 6 da Universidade Federal do Rio Grande - FURG, realizou-se a décima segunda sessão de defesa de dissertação do ano de dois mil e dezanove do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional. A mestranda **Rosaura Dias de Macedo** apresentou e defendeu a dissertação "**Modelo de dispersão de contaminantes na camada limite planetária usando derivada de Hausdorff**" como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional. A sessão foi aberta às quatorze horas pelo Prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart, orientador da dissertação e presidente da Comissão de Avaliação. A referida Comissão esteve integrada, além do presidente e orientador, pelo Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo, Coorientador, da FURG, Prof. Dr. Adriano De Cezaro, da FURG, pela Prof. Dr. Julian Moises Seije Suarez, da FURG, e pelo Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho, da UFPel. Após cada integrante da Banca ter arguido o mestrando, e este ter tido a oportunidade de responder a cada um, a Comissão reuniu-se para deliberar sobre o conceito a ser atribuído ao trabalho. A Comissão de Avaliação considerou o candidato **APROVADO**..... neste requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional. Por fim, o presidente publicou e encerrou a sessão da qual eu, Wiliam Correa Marques, na qualidade de Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, lavrei a presente ata que vai assinada por todos os membros da Comissão de Avaliação. Rio Grande, vinte e seis de junho de 2019.


Prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart


Orientador


Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo

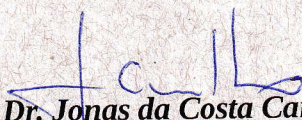
Coorientador


Prof. Dr. Adriano De Cezaro

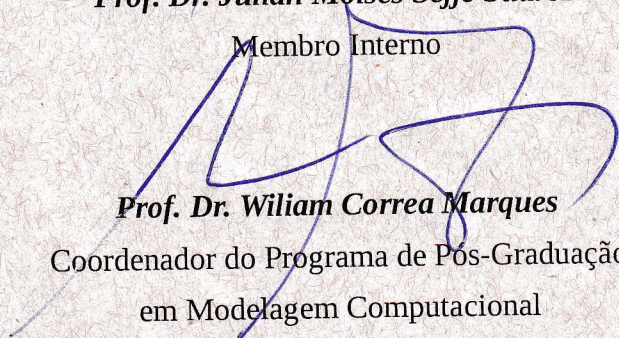
Membro Interno


Prof. Dr. Julian Moises Seije Suarez

Membro Interno


Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho

Membro Externo


Prof. Dr. Wiliam Correa Marques
Coordenador do Programa de Pós-Graduação
em Modelagem Computacional

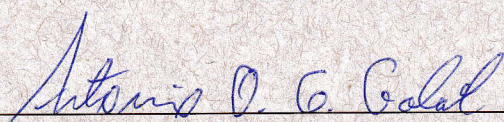
Rosaura Dias Macedo

“ Modelo de dispersão de contaminantes na camada limite planetária usando derivada de Hausdorff ”

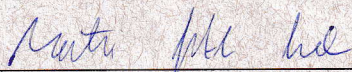
Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal do Rio Grande - FURG, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre. Área concentração: Modelagem Computacional.

Aprovado em

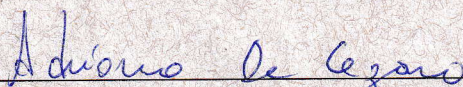
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart
Orientador – FURG



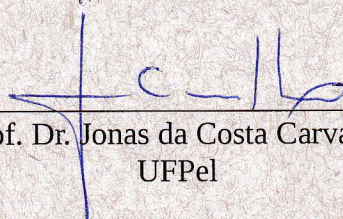
Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo
Coorientador - FURG



Prof. Dr. Adriano De Cezaro
FURG



Prof. Dr. Julian Moises Seije Suarez
FURG



Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho
UFPel

Rio Grande - RS
2019

AGRADECIMENTOS

Minha gratidão ao criador deste universo pela oportunidade de estarmos aqui em constante evolução e aprendizado. Gratidão a todos que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho. Em especial ao meu orientador Prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart, ao meu co-orientador Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo, aos membros da banca Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho, Prof. Dr. Julian Moises Seije Suarez e Prof. Dr. Adriano De Cezaro. Os autores agradecem ao apoio financeiro do CNPq e CAPES, e a Universidade Federal do Rio Grande (FURG).

RESUMO

No presente trabalho é proposto uma nova parametrização para o fluxo de concentração usando a derivada de Hausdorff. Uma equação de ordem fracionária nas direções longitudinal e vertical é usada para obter a distribuição da concentração de contaminantes na camada limite planetária. O modelo é resolvido e a solução é comparada com experimentos reais e com os modelos tradicionais de derivadas de ordem inteira. Mostra-se que o modelo fracionário apresenta resultados muito bons em comparação aos dados experimentais, e tem melhor performance que o modelo Gaussiano tradicional. De fato, o modelo usando derivada de Hausdorff, com velocidade do vento e coeficiente de difusão constantes, apresenta uma performance muito melhor do que alguns modelos encontrados na literatura, onde a velocidade do vento e o coeficiente de difusão são considerados como funções da posição. Os resultados obtidos mostram que a estrutura da equação diferencial de ordem fracionária é mais apropriada para calcular a distribuição da dispersão de contaminantes em um fluxo turbulento do que a equação diferencial de ordem inteira. Um resultado muito importante encontrado é que deve haver uma relação entre a ordem α da derivada de Hausdorff e a estrutura física do fluxo turbulento.

Palavras-chaves: Dispersão de contaminantes, Derivada de Hausdorff, Fluxo de concentração.

ABSTRACT

In the present work, we propose a new parameterization for the concentration flux using a Hausdorff derivative. The fractional order differential equation in the longitudinal and vertical positions is used to obtain the concentration distribution of contaminants in the Planetary Boundary Layer. We solve this model and we compare the solution against both real experiments and traditional integer order derivative models. We show that our fractional model gives very good results in fitting the experimental data, and perform far better than the traditional Gaussian model. In fact, the Hausdorff derivative model, with constant wind speed and constant eddy diffusivity, performs even better than some models found in the literature where it is considered that the wind speed and eddy diffusivity are functions of the position. The results obtained show that the structure of the fractional order differential equation is more appropriate to calculate the distribution of dispersed contaminants in a turbulent flow than an integer-order differential equation. Furthermore, a very important result we found it is that there should be a relation between the order α of the fractional derivative with the physical structure of the turbulent flow.

Palavras-chaves: Dispersion of contaminants, Hausdorff derivative, Concentration flux.

Conteúdo

1	Introdução	10
1.1	Trabalho Proposto	10
1.2	Objetivos	11
1.2.1	Objetivo Geral	11
1.2.2	Objetivos Específicos	11
2	Referencial Teórico	12
2.1	Camada Limite Planetária	12
2.1.1	Camada Limite Convectiva	13
2.1.1.1	Camada Limite Superficial	13
2.1.1.2	Camada Limite de Mistura	14
2.1.1.3	Zona de Entranhamento	14
2.1.2	Camada Limite Estável	14
2.2	Processo de Difusão Anômala	15
2.3	Teoria de Fractais	18
2.3.1	Métrica	19
2.3.2	Medida	20
2.3.3	Medida e Dimensão de Hausdorff	21
2.3.3.1	Medida de Hausdorff	27
2.3.3.2	Dimensão de Hausdorff	28
2.4	Derivada Métrica	32
2.5	Derivada de Hausdorff	35
3	Modelagem Matemática	36
3.1	Solução da equação (3.21)	39
3.2	Solução da equação (3.23)	40
4	Experimentos e Índices Estatísticos	54
4.1	Índices Estatísticos	54
4.2	Dados Experimentais	55
4.3	O Experimento de Copenhagen	56
4.4	O Experimento de Prairie Grass	58
4.5	O Experimento de Hanford	61
5	Resultados e Discussões	62
5.1	Resultados para $\frac{h}{ L } < 10$	62
5.1.1	Experimento de Copenhagen	62
5.1.2	Experimento de Prairie Grass	65
5.1.3	Experimento de Hanford	68
5.2	Resultados para $\frac{h}{ L } > 10$	71
6	Conclusões	73
7	Apêndice	75

7.1	Apêndice 1 - Regras de derivação das derivadas métricas	75
8	Referências	79

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Troposfera dividida em duas partes: a camada limite próxima a superfície e a atmosfera livre acima dela. Fonte: http://www.iag.usp.br/meteo/labmicro/ . . .	12
Figura 2.2: Ciclo diurno da CLP. Fonte: https://pt.slideshare.net/DafmetUfpel/samet2012 .	13
Figura 2.3: Construção do conjunto do terço médio de Cantor F , pela remoção repetida do terço médio dos intervalos. Note que F_L e F_R , a parte esquerda e direita de F são cópias de F escalonadas por um fator de $\frac{1}{3}$. Fonte: [25]	21
Figura 2.4: (a) Construção da curva de Koch F . A cada estágio o terço médio de cada segmento é substituído por dois lados de um triângulo equilátero baseado no segmento retirado. (b) Três curvas de Koch colocadas juntas para formar a curva snowflake. Fonte: [25]	24
Figura 2.5: Construção do triângulo de Sierpinski ($\dim_H F = \dim_B F = \log 3 / \log 2$) Fonte: [25]	25
Figura 2.6: Construção da poeira de Cantor ($\dim_H F = \dim_B F = 1$) Fonte: [25]	25
Figura 2.7: Conjunto de Julia. Fonte [25]	26
Figura 2.8: Conjunto F e duas δ -coberturas possíveis para F . O ínfimo do $\sum U_i ^s$ sobre todas as δ -coberturas $\{U_i\}$ nos dá $\mathcal{H}_\delta^s(F)$. Fonte: [25]	28
Figura 2.9: Escalonando conjuntos por um fator λ aumentamos o comprimento por um fator λ , a área por λ^2 e uma medida de Hausdorff s -dimensional por λ^s Fonte: [25] . .	29
Figura 2.10: Gráfico de $\mathcal{H}^s(F)$ em comparação a s para um conjunto F . A dimensão de Hausdorff é o valor de s quando o salto de ∞ para 0 ocorre. Fonte: [25]	30
Figura 2.11: Gráfico de $w(x)$ com $a = 0.5$ e $b = 3$. Fonte: [27]	33
Figura 4.1: Ilustração do experimento de Copenhagen. Fonte: adaptado de [33]	56
Figura 4.2: Ilustração do experimento de Prairie Grass (vista superior).	58
Figura 5.1: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Copenhagen (instável).	64
Figura 5.2: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (a) $x = 200m$	66
Figura 5.3: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (b) $x = 800m$	66
Figura 5.4: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (c) $x \geq 200m$	67
Figura 5.5: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (d) $x \geq 400m$	67
Figura 5.6: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Hanford. (a) $x = 1600m$	69
Figura 5.7: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Hanford. (b) $x = 3200m$	70
Figura 5.8: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Hanford. (c) $x \geq 1600m$	70

LISTA DE TABELAS

Tabela 1:	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen. Fonte: [33]	57
Tabela 2:	Concentrações observadas lateralmente ($c^y(x, 0)/Q$) ($10^{-4} sm^{-2}$) do experimento de Copenhagen. Fonte: [33]	57
Tabela 3:	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Prairie Grass (Casos Instáveis). Fonte: [35]	59
Tabela 4:	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Prairie Grass (Casos Estáveis). Fonte: [35]	60
Tabela 5:	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford. Fonte: [35]	61
Tabela 6:	Experimento de Copenhagen para $\frac{h}{ L } < 10$ (instável)	63
Tabela 7:	Experimento de Prairie Grass para $\frac{h}{ L } < 4$ (estável)	65
Tabela 8:	Experimento de Hanford para $\frac{h}{ L } \leq 3$ (estável)	68
Tabela 9:	Experimento de Copenhagen para $\frac{h}{ L } > 10$ (instável)	71

1 INTRODUÇÃO

Vive-se a maior parte da vida próximo a superfície da terra, onde é possível sentir o calor de um dia de sol e o calafrio do ar noturno. Neste ambiente cultiva-se colheitas, constrói-se moradias e a maioria do comércio acontece, familiariza-se com as brisas e os microclimas de determinada região, e sente-se o contraste climático quando viaja-se a outros lugares. Com o avanço da tecnologia e da indústria, também houve o aumento da emissão de contaminantes na atmosfera, os quais causam grandes preocupações quanto à preservação do meio ambiente, e por essa razão é tão importante que estudos sejam aprofundados nesta área, com o intuito de que ferramentas cada vez mais eficazes possam ser criadas para monitorar estes fenômenos.

A dispersão de contaminantes na atmosfera é fonte permanente de problemas desafiadores devido a sua complexidade física. A descrição da difusão sobre uma atmosfera turbulenta é um exemplo de problema não trivial, pois a turbulência gera um processo de difusão anômala. Historicamente a difusão anômala foi primeiramente observada na natureza em um fenômeno de dispersão de contaminantes. Em 1926, Richardson mediu o aumento da largura das plumas de fumaça geradas por uma fonte pontual contínua em um campo de velocidades turbulentas, especulando então que a velocidade do ar turbulento pode ser aproximada pela função de Weierstrass [1], mais adiante veremos que esta função possui comportamento fractal.

Nesse contexto, os estudos sobre dispersão de contaminantes são de grande valia para que se possa estimar as concentrações de contaminantes emitidos pelas fontes atuais, esta previsão pode ser feita de duas formas: experimentalmente (observação de campo) ou pela modelagem do problema físico através de equações matemáticas (simulação). Na observação de campo tem-se a vantagem de trabalhar com dados reais, porém o alto custo e a dificuldade de medição são duas grandes desvantagens. Por essa razão a simulação acaba tendo preferência devido ao seu baixo custo, além de proverem resultados mais rápidos, no entanto são resultados aproximados, pois é necessário que algumas simplificações do problema real sejam feitas [2].

A dispersão de contaminantes em um escoamento turbulento é um fenômeno de múltiplas escalas e isso precisa aparecer nos modelos que o simulam. Com este intuito é que neste trabalho faz-se uma modificação na estrutura matemática da equação de difusão-advectação inserindo a derivada de Hausdorff que é um caso particular das derivadas métricas, desta forma obtêm-se equações que podem ser resolvidas de maneira simples e por métodos amplamente conhecidos, como o método de Frobenius.

1.1 Trabalho Proposto

Neste trabalho é proposto um modelo bidimensional para investigar a dispersão de contaminantes na Camada Limite Planetária usando a derivada de Hausdorff. É importante destacar que o diferencial deste trabalho se dá pelo fato de que quando aplica-se a derivada de Hausdorff para resolver a equação de difusão-advectação obtemos como resposta duas equações diferenciais ordinárias que facilitam a solução do problema.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo Geral

O objetivo principal deste trabalho é apresentar uma abordagem alternativa para a modelagem da dispersão de contaminantes emitidos por uma fonte pontual contínua na camada limite planetária empregando a derivada de Hausdorff.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Resolver a equação de difusão-advecção utilizando a derivada de Hausdorff.
- Testar o modelo em diferentes condições de estabilidade.
- Avaliar o modelo comparando as concentrações previstas pelo modelo com as observadas nos experimentos de Copenhagen, Prairie Grass e Hanford.
- Comparar a performance do modelo com outros modelos disponíveis na literatura.

Este trabalho encontra-se organizado em 8 capítulos. No Capítulo 2 apresenta-se o referencial teórico sobre a camada limite planetária, o processo de difusão anômala, a teoria de fractais, as derivadas métricas e a derivada de Hausdorff. No capítulo 3 são apresentadas a modelagem matemática do problema e as soluções das duas equações obtidas. Já no capítulo 4 apresenta-se os índices estatísticos utilizados para realizar o estudo comparativo entre os valores de concentrações observados nos experimentos e os valores previstos pelo modelo, bem como os dados dos experimentos de Copenhagen, Prairie Grass e Hanford. Apresenta-se no capítulo 5 os resultados obtidos no modelo proposto e as discussões. No capítulo 6 encontra-se a conclusão. No apêndice, capítulo 7, encontra-se as regras de derivação das derivadas métricas. e finalmente no capítulo 8 as referências.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Apresenta-se neste capítulo o detalhamento do ambiente de estudo, em seguida faz-se uma breve introdução à teoria de fractais, que é pré-requisito para o entendimento das derivadas métricas, em especial a derivada de Hausdorff.

2.1 Camada Limite Planetária

As características da atmosfera próxima a superfície da terra não são típicas das observadas no resto da atmosfera, devido a influência da terra nas camadas mais baixas de ar. Os processos de transporte são modificados a uma distância de 100 a 3000 m da superfície, criando a Camada Limite Planetária (CLP), ver figura (2.1).

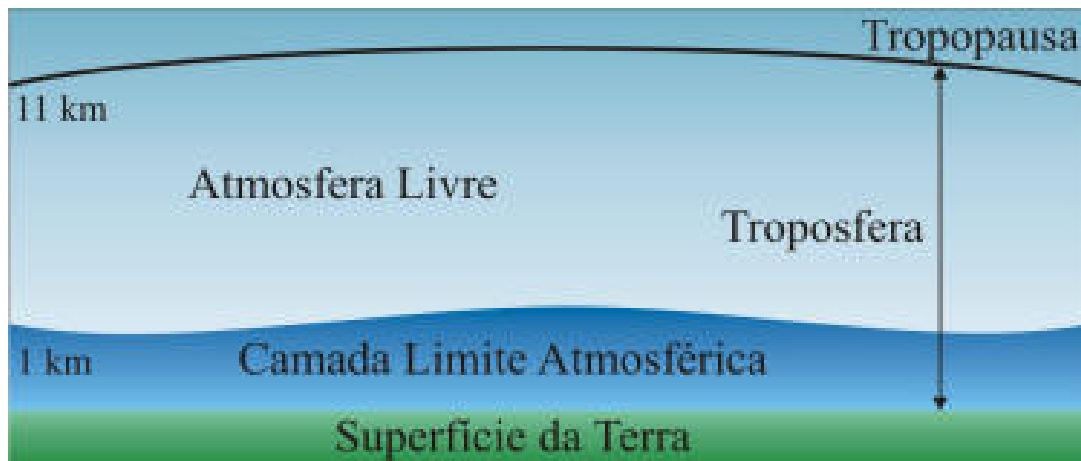


Figura 2.1: Troposfera dividida em duas partes: a camada limite próxima a superfície e a atmosfera livre acima dela. Fonte: <http://www.iag.usp.br/meteo/labmicro/>

Denomina-se Camada Limite Planetária a parte da Troposfera que é diretamente influenciada pela superfície da terra, e responde aos forçantes da superfície numa escala de tempo igual ou inferior a 1 hora [3].

Esta influência se dá devido a absorção da terra de cerca de 90% do calor recebido pela radiação solar, e o fato de aquecer e esfriar força mudanças na CLP através dos processos de transporte. A turbulência é o mais importante destes processos e algumas vezes também é utilizada para definir a camada limite. Rajadas de vento sobrepostas, podem ser visualizadas como um conjunto de turbilhões de movimento irregular denominados redemoinhos, normalmente a turbulência consiste de redemoinhos de tamanhos variados sobrepostos. A força de arrasto do fluxo de ar sobre a terra causa o cisalhamento do vento, o qual frequentemente se torna turbulento. Obstáculos como árvores e construções desviam o fluxo causando ondas de turbulência.

Sobre a superfície da terra em regiões de alta pressão a CLP tem uma estrutura definida que evolui com o ciclo diurno, ver figura (2.2).

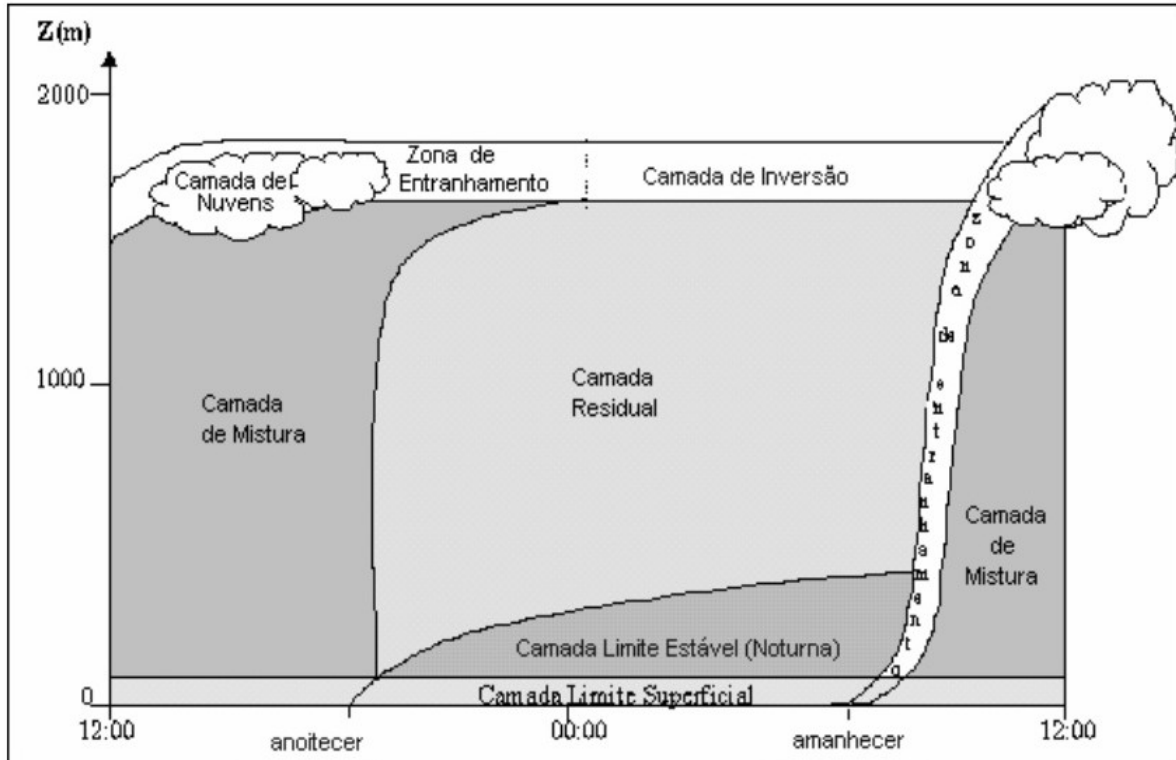


Figura 2.2: Ciclo diurno da CLP. Fonte: <https://pt.slideshare.net/DafmetUfpel/samet2012>

2.1.1 Camada Limite Convectiva

A camada limite convectiva (CLC) é constituída pelo conjunto de três partes da camada limite planetária, que são: a camada superficial, a camada de mistura e a zona de entranhamento, ver figura (2.2).

2.1.1.1 Camada Limite Superficial A camada limite superficial (CLS) corresponde a aproximadamente 10% do total da CLP, nesta zona as forças inerciais predominam sobre as viscosas, há forte variação dos gradientes das variáveis atmosféricas médias, como temperatura e momento. Em 1954 foi desenvolvida a Teoria Universal de Similaridade de Monin-Obukhov (TSMO) [4] para avaliar as inter-relações entre essas variáveis, o comprimento de Monin-Obukhov (L) é o parâmetro de avaliação do grau de estabilidade e é dado por:

$$L = -\frac{u_*^3}{k \left(\frac{g}{\theta}\right) (\overline{w\theta})} \quad (2.1)$$

onde u_* é a velocidade de atrito, k é a constante de Von Karman, encontrada na literatura como 0,4 [3], g é a aceleração da gravidade, θ é a temperatura potencial média e $\overline{w\theta}$ é o fluxo de calor sensível. L é uma escala de altura, que é proporcional a uma altura acima da superfície onde os fatores de empuxo térmico do ar são equivalentes à produção mecânica de turbulência. Quando L é positivo o fluxo turbulento de calor sensível é negativo e neste caso a CLS é estável.

Quando L é negativo o fluxo vertical turbulento de calor sensível é positivo e neste caso a CLS é instável ou convectiva (convecção térmica). Quando tende para infinito o fluxo é nulo, portanto a CLS é neutra, neste caso a TSMO indica que o perfil de velocidade média é logarítmica.

2.1.1.2 Camada Limite de Mistura A turbulência na camada limite de mistura (CLM) é geralmente conduzida convectivamente. Fontes convectivas incluem transferência de calor e resfriamento, ambos podem ocorrer simultaneamente. Mesmo quando a convecção é o mecanismo dominante, geralmente existe cisalhamento do vento através do topo da CLM que contribui para a geração de turbulência. Inicia cerca de meia hora após o nascer do sol e é caracterizada pela mistura intensa de ar quente que sobe a partir da superfície aquecida pela incidência da radiação solar. A CLM atinge sua profundidade máxima à tardinha. A turbulência resultante tende a misturar calor, umidade e momentum. A maioria das fontes de contaminantes estão próximas a superfície da terra. Portanto, a concentração de contaminantes pode acumular na CLM. Os contaminantes são transportados pelo escoamento turbulento. A captura de contaminantes nessa camada é comum e as vezes levam a alertas de poluição em grandes comunidades.

2.1.1.3 Zona de Entranhamento A camada estável no topo da CLM é chamada zona de entranhamento (onde a transição na camada mista ocorre), age como uma tampa para o ar quente que sobe, restringindo o domínio da turbulência.

2.1.2 Camada Limite Estável

Conforme a noite avança, ocorre o resfriamento da superfície da Terra e surge uma Camada Limite Estável (CLE). É caracterizada pelo ar estáticamente estável com turbulência mais fraca e esporádica. Contaminantes emitidos na CLE se dispersam relativamente pouco na vertical, eles se dispersam, ou se espalham, com maior rapidez na horizontal. O comportamento dos ventos é muito complexo durante a noite, a velocidade do vento é baixa apenas acima do nível do solo. Em altitudes por volta de 200 m acima do solo o vento pode chegar a 10-30 m/s.

2.2 Processo de Difusão Anômala

A dispersão de contaminantes na atmosfera é uma fonte permanente de problemas desafiadores devido à sua complexidade. Um exemplo de problema não trivial é a descrição da difusão sob turbulência atmosférica. De fato, a turbulência é a razão por trás da dispersão de contaminantes na atmosfera, já que sem turbulência os contaminantes seguiriam apenas as linhas de corrente das velocidades médias do vento, exibindo uma difusão mínima em outras direções. Uma notável consequência da turbulência é o surgimento da difusão anômala. 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. A difusão anômala está estreitamente relacionada com a falha do teorema central do limite devido à distribuição esparsa ou correlações à longa distância. Na verdade, a difusão anômala está relacionada ao teorema mais geral de Lévy-Gnedenko que generaliza o teorema central do limite para situações onde nem todos os momentos existem [5]. Historicamente, a difusão anômala foi observada pela primeira vez na natureza no fenômeno da dispersão de contaminantes. Em 1926, Richardson mediu o aumento da largura das plumas de fumaça geradas a partir de fontes pontuais localizadas em um campo de velocidade turbulenta [1, 5, 6, 7]. Com base em suas observações, Richardson especulou que a velocidade do ar turbulento, que tem uma estrutura não diferenciável, pode ser descrita aproximadamente pela função de Weierstrass. Isso foi motivado em parte pela observação de que a largura das plumas de fumaça cresce com t^α ($\alpha \geq 3$), diferentemente da difusão comum onde $\alpha = 1$. Além disso, o comportamento não diferenciável do crescimento de largura de plumas gerado a partir de uma fonte pontual é diretamente relacionado à estrutura fractal do campo de velocidade turbulenta, onde as escalas de tamanho de flutuação são, em muitos casos, muito grandes comparadas à escala média.

Neste contexto, as equações diferenciais tradicionais não descrevem adequadamente o problema da difusão turbulenta porque as derivadas usuais não são bem definidas no comportamento não diferenciável introduzido pela turbulência. Consequentemente, espera-se que as equações clássicas de advecção-difusão não expliquem completamente a difusão anômala de contaminantes, já que neste caso, os parâmetros do sistema geralmente crescem mais rapidamente do que as soluções obtidas pelos modelos clássicos [7]. Contudo, apesar disso, os modelos eulerianos e lagrangianos tradicionais são os mais utilizados na modelagem da dispersão de contaminantes na atmosfera [8, 9, 10, 11, 12]. Os modelos eulerianos consistem basicamente na solução da equação de advecção-difusão e os modelos Lagrangeanos são baseados na solução da equação de Langevin. Para lidar com difusão anômala, um procedimento comum usado na literatura para modificar modelos eulerianos é assumir que a estrutura física dos fluxos turbulentos e dos campos de velocidade são descritas por um coeficiente de difusão complexo e um perfil de velocidades, ambos são considerados como funções de coordenadas espaciais. Essas funções são geralmente escolhidas para se adequar aos dados experimentais ou são obtidos da teoria de difusão estatística de Taylor [13, 14, 15, 16].

O modelo de dispersão proposto no presente trabalho, ao contrário dos modelos usualmente

encontrados na literatura, não resolve a equação de advecção-difusão expressa tradicionalmente, mas modifica a estrutura matemática dessa equação para representar de forma mais realista a evolução no espaço da concentração de contaminantes dispersos em um fluxo turbulento. Nesse sentido, são introduzidos operadores fracionários na equação que governa a distribuição de contaminantes na atmosfera. O uso destes operadores na modelagem da difusão turbulenta é justificado pelo comportamento não diferenciável no problema e pela presença de difusão anômala. Nas últimas décadas, milhares de trabalhos foram realizados com o objetivo de explicar a difusão anômala. No entanto, poucos trabalhos tratam da análise da validade de modelos baseados em equações diferenciais clássicas e/ou do uso de operadores diferenciais não usuais, para descrever sistemas que apresentam comportamento não diferencial e/ou dinâmica anômala. O uso de derivadas fracionárias no estudo de sistemas de estados estacionários, e em particular na dispersão de contaminantes na atmosfera, é pouco explorado.

Uma equação para a distribuição espacial da concentração de um contaminante não reativo na CLP pode ser obtida por uma aplicação do princípio de continuidade ou conservação de massa, onde os fluxos são representados pela teoria K [17, 18]. Em um sistema de coordenadas cartesianas na qual a direção longitudinal x coincide com a velocidade média do vento, a distribuição espacial da concentração $\bar{c} = \bar{c}(x, y, z)$ de uma substância não reativa pode ser descrita pela equação de advecção-difusão

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right), \quad (2.2)$$

onde consideramos apenas o estado estacionário, $u = u(z)$ é a velocidade média do vento na direção longitudinal e K_x, K_y, K_z são os coeficientes de difusão. A equação da concentração integrada ($\bar{c}^y = \bar{c}^y(x, z)$) é obtida integrando a Eq. (2.2) em y de $-\infty$ a $+\infty$ (negligenciando a difusão longitudinal),

$$u \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} \right), \quad (2.3)$$

Um processo governado pelo regime de estado estacionário da equação de advecção-difusão (2.3) com K_z constante é chamado de processo Gaussiano, com uma condição de fronteira $\bar{c}^y_0(z) = \lim_{x \rightarrow 0} \bar{c}^y(x, z) = \delta(z)$ no domínio $0 \leq x < \infty$ e $-\infty < z < \infty$ a solução de (2.3) é dada pela forma gaussiana

$$\bar{c}^y(x, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi K_z x}} \exp\left(\frac{-z^2}{4K_z x}\right). \quad (2.4)$$

Por outro lado, tomando uma transformada de Fourier de (2.3) obtemos uma equação de relaxação para um número de onda fixo k ,

$$u \frac{\partial \bar{c}^y(x, k)}{\partial x} = -K_z k^2 \bar{c}^y(x, k), \quad (2.5)$$

o que implica que os modos individuais de (2.3) em domínios retangulares decaem exponenci-

almente em x

$$\overline{c^y}(x, k) = \overline{c^y}(0, k) \exp(-K_z k^2 x), \quad (2.6)$$

onde estabelecemos por simplicidade $u = 1$. Consequentemente, para um processo Gaussiano, os modos individuais da concentração seguem uma distribuição exponencial na direção longitudinal x . Na verdade, a distribuição gaussiana para a concentração (2.4) e seu modo de distribuição exponencial (2.6) são características do processo de difusão normal, exibindo um deslocamento quadrático médio linear

$$\langle z^2(x) \rangle = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^2}{dk^2} \overline{c^y}(x, k) = 2K_z x. \quad (2.7)$$

Por outro lado, na maioria dos casos, o processo de difusão anômala exibe uma lei de potência significando um deslocamento quadrático médio $\langle z^2 \rangle \propto x^\alpha$ com $0 < \alpha < 1$ [5].

2.3 Teoria de Fractais

Em 1975 Benôit Mandelbrot publicou “Os objetos fractais: forma, acaso e dimensão”, onde expôs suas ideias desenvolvidas desde 1962 sobre uma geometria capaz de descrever com precisão as irregularidades da natureza. Desde o início do século XX, diversos cientistas e matemáticos verificaram a inabilidade da geometria euclidiana para descrever a forma de nuvens, fumaças de chaminés, linhas costeiras, árvores, etc. Esta inabilidade vem do fato que muitas formas e trajetórias na natureza são tão irregulares e fragmentadas que não podem ser descritas, ou mesmo aproximadas, pelos objetos regulares da geometria euclidiana (linhas, círculos, planos, etc.). No entanto, apesar da enorme complexidade, a maioria destas formas e trajetórias da natureza apresentam em muitos casos, leis de escala relativamente simples, [7, 19]. Estas leis de escala motivaram a introdução do conceito de geometria fractal.

Os fractais são objetos matemáticos que descrevem formas irregulares infinitamente complexas, porém invariantes por uma transformação de escala. Além disso, os fractais são úteis para o estudo do movimento browniano, a turbulência de fluidos, a rugosidade da superfície de certos materiais, a porosidade de certas rochas, entre outros. Hoje sabe-se que muitos fenômenos naturais como condições de tempo, fluxo de fluidos turbulentos e arritmias cardíacas e cerebrais apresentam comportamento fractal, [20]. Os fractais apresentam propriedades e características muito peculiares. Entre estas peculiaridades tem-se que o gráfico de funções fractais apresenta propriedades muito diferentes das de curvas geométricas habituais, mostrando auto-similaridade, estrutura fina, simplicidade da lei de formação e dimensão não inteira, [21].

Devido a estas irregularidades encontradas na natureza e nos objetos fractais, torna-se inapropriado o uso das ferramentas do cálculo clássico para estudar fenômenos naturais descritos por funções que apresentam comportamento fractal. Um exemplo é a função de Weierstrass que descreve com boa aproximação as plumas de chaminé, [7]. Esta função, embora contínua em todos os pontos da reta real, é não diferenciável em todos os pontos. Por outro lado, nas últimas décadas surgiram diversas propostas de extensão dos conceitos do cálculo com grande potencial de aplicação para o estudo de fenômenos e funções fractais. Entre essas extensões vamos estudar neste trabalho a derivada métrica, que é uma generalização natural da derivada usual, mas pode ser aplicada em um conjunto maior de funções, incluindo algumas classes de funções não diferenciáveis.

Para funções diferenciáveis, as derivadas métricas contém, como caso especial, diversas formulações de derivadas deformadas importantes. Entre elas vamos destacar a derivada de Hausdorff, que surge no mapa de domínios fractais para o contínuo, [22].

Objetos fractais têm estrutura muito complexa para serem estudados pelos métodos clássicos da geometria analítica e do cálculo, para estudá-los é necessária a definição de novos conceitos, como o de dimensão de Hausdorff, e o uso de novas áreas da matemática. Entre essas novas áreas está o cálculo fracionário e as derivadas deformadas, nos últimos anos houve um crescimento muito grande do uso do cálculo fracionário e derivadas deformadas para o estudo de funções e problemas definidos em domínios fractais.

2.3.1 Métrica

No espaço Euclidiano n -dimensional \mathbb{R}^n , $\mathbb{R}^1 = \mathbb{R}$ é o conjunto de números reais na reta real, \mathbb{R}^2 é o plano, e assim sucessivamente. Os pontos no \mathbb{R}^n são denotados pelas letras x e y , na forma de coordenadas como $x = (x_1, \dots, x_n)$ e $y = (y_1, \dots, y_n)$. Nestes espaços utiliza-se do conceito de distância, ou métrica, Euclidiana, e o conceito de medida. A métrica e a medida Euclidiana estão relacionadas à conceitos da geometria Euclidiana. Sejam x e y pontos no \mathbb{R}^n , a distância entre eles é dada por $|x - y| = \sqrt{(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^2)}$. Por outro lado, a medida está relacionada a dimensão de subconjuntos do \mathbb{R}^n , chamamos μ a medida em \mathbb{R}^n [23, 24, 25].

Uma métrica em um conjunto M é uma função $d : M \times M \rightarrow \mathbb{R}^+$, que associa a cada par ordenado de elementos de $x, y \in M$ um número real positivo $d(x, y)$, chamado distância de x a y , de modo que as seguintes condições sejam satisfeitas para quaisquer $x, y, z \in M$:

- 1) $d(x, y) \geq 0$ se $x \neq y$ e $d(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$;
- 2) $d(x, y) = d(y, x)$;
- 3) $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$.

A condição 1) diz que $d(x, y)$ é sempre positiva, e se anula se, e somente se $x = y$. A condição 2) afirma que a distância $d(x, y)$ é uma função simétrica das variáveis x, y . A condição 3) é chamada de *desigualdade triangular* e se inspira na geometria euclidiana, onde cada lado de um triângulo tem medida menor que a soma das medidas dos outros dois lados.

Um *espaço métrico* é um par (M, d) , onde M é um conjunto e d uma métrica em M . Os elementos de um espaço métrico podem ser de natureza bastante arbitrária: números, pontos, vetores, matrizes, funções, conjuntos, etc. Vejamos agora alguns exemplos de espaços métricos:

Exemplo 1: A métrica "zero-um"

Qualquer conjunto M pode tornar-se um espaço métrico de maneira muito simples. Basta definir a métrica $d : M \times M \rightarrow \mathbb{R}$ pondo $d(x, y) = 0$ se $x = y$ e $d(x, y) = 1$ se $x \neq y$. As condições 1) a 3) são verificadas.

Exemplo 2: Subespaço, métrica induzida

Se (M, d) é um espaço métrico, todo subconjunto $S \subset M$ pode ser considerado como um espaço métrico: basta considerar a restrição de d a $S \times S$, ou seja, usar entre os elementos de S a mesma distância que eles possuíam como elementos de M . Quando fazemos isto, S chama-se um *subespaço* de M e a métrica de S *induzida* pela de M .

Exemplo 3: A métrica euclidiana na reta

O conjunto \mathbb{R} dos números reais munido da métrica euclidiana (métrica da reta), é o exemplo mais importante de espaço métrico. A distância entre dois pontos $x, y \in \mathbb{R}$ é dada por $d(x, y) = |x - y|$. As condições 1) a 3) resultam imediatamente das propriedades elementares do valor absoluto de números reais. Esta é a chamada "métrica usual" da reta.

2.3.2 Medida

O conceito de medida está relacionada a noção de tamanho, ou dimensão, de subconjuntos do \mathbb{R}^n , chamamos μ a medida em \mathbb{R}^n , tal que:

- a) $\mu(\emptyset) = 0$;
- b) $\mu(A) \leq \mu(B)$ se $A \subset B$;
- c) Se A_1, A_2, \dots formam uma sequência enumerável (ou finita) de conjuntos então

$$\mu \left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \right) \leq \sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i) \quad (2.8)$$

se A_i for um conjunto disjunto então 2.8 se torna uma igualdade

$$\mu \left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i) \quad (2.9)$$

Chamamos de $\mu(A)$ a medida do conjunto A onde $\mu(A)$ é o tamanho do conjunto A medido por algum caminho. A condição (a) nos diz que a medida do conjunto vazio é nula, a condição (b) nos diz que a medida do conjunto A é menor que a do conjunto B se A estiver contido em B , e (c) nos diz que a medida da união dos conjuntos é menor que o somatório da medida dos conjuntos, se eles forem disjuntos então temos uma igualdade [23, 24, 25].

Vejamos os exemplos a seguir:

Exemplo 1: A medida de contagem

Para cada subconjunto A de \mathbb{R}^n , considere que $\mu(A)$ é o número de pontos em A se A é finito, e ∞ se for infinito. Então μ é uma medida em \mathbb{R}^n .

Exemplo 2: Ponto de massa

Considere a um ponto do \mathbb{R}^n e defina $\mu(A)$ sendo 1 se A contém a , e 0 caso contrário. Então μ é a distribuição de massa considerada como um ponto de massa concentrado em a .

Exemplo 3: Medida de Lebesgue no \mathbb{R}

A medida de Lebesgue \mathcal{L}^1 amplia a ideia de comprimento de uma grande coleção de subconjuntos de \mathbb{R} que inclui o conjunto de Borel. Para intervalos abertos e fechados temos que $\mathcal{L}^1(a, b) = \mathcal{L}^1[a, b] = b - a$. Se $A = \bigcup_i [a_i, b_i]$ é uma união finita ou contável de intervalos disjuntos, consideramos que $\mathcal{L}^1(A) = \sum (b_i - a_i)$ é o comprimento de A através da soma do comprimento dos intervalos. Isso nos leva a definição da medida de Lebesgue $\mathcal{L}^1(A)$ para um conjunto A arbitrário. Definimos:

$$\mathcal{L}^1(A) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} (b_i - a_i) : A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} [a_i, b_i] \right\}$$

ou seja, olhamos para todas as coberturas de A através de coleções de conjuntos contáveis

e pegamos o menor comprimento possível. A medida de Lebesgue em \mathbb{R} é o comprimento euclidiano, e podemos escrever o comprimento (A) como $\mathcal{L}^1(A)$.

Exemplo 4: Distribuição de massa uniforme em um segmento de reta

Considere L um segmento de reta unitário no plano. Defina $\mu(A) = \mathcal{L}^1(L \cap A)$, isto é, o comprimento da intersecção de A com L , então μ é a distribuição de massa com suporte L , desde que $\mu(A) = 0$ se $A \cap L = \emptyset$. Podemos pensar μ como massa unitária espalhada uniformemente ao longo do segmento de reta L .

2.3.3 Medida e Dimensão de Hausdorff

Até o final do século XIX, os matemáticos preocuparam-se com conjuntos e funções que os métodos clássicos do cálculo pudessem ser aplicados. Conjuntos e funções que não fossem suficientemente suaves ou regulares costumavam ser ignorados. Mas recentemente esta atitude mudou, muitos estudos e descobertas têm sido feitas sobre a matemática dos objetos não suaves. Além disso, os conjuntos irregulares fornecem uma melhor representação de muitos fenômenos naturais, do que as figuras da geometria clássica. Neste contexto, a geometria fractal fornece uma estrutura geral para o estudo de tais conjuntos irregulares. Vamos começar olhando brevemente alguns exemplos simples de fractais e suas estruturas [25].

O conjunto do terço médio de Cantor é o fractal mais conhecido e o de mais simples construção, mesmo assim ele exibe muitas características não usuais, típicas dos fractais. Ele é construído a partir de um intervalo unitário, por uma sequência de operações de eliminação, conforme nos mostra a Figura (2.3).

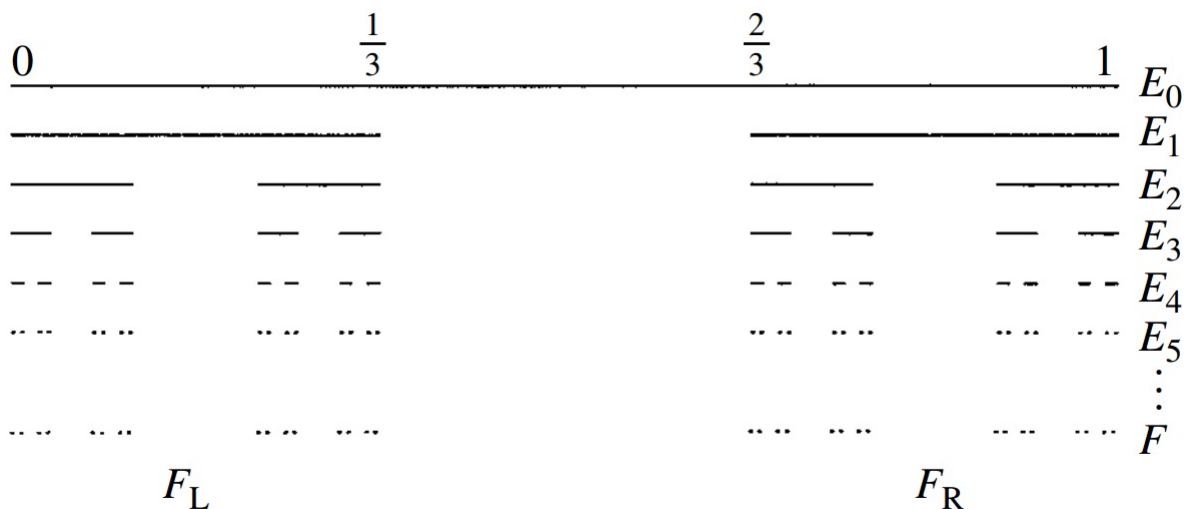


Figura 2.3: Construção do conjunto do terço médio de Cantor F , pela remoção repetida do terço médio dos intervalos. Note que F_L e F_R , a parte esquerda e direita de F são cópias de F escalonadas por um fator de $\frac{1}{3}$. Fonte: [25]

Seja E_0 o intervalo $[0, 1]$. Seja E_1 o conjunto obtido após a retirada do terço médio de

E_0 , então E_1 consiste de dois intervalos $[0, \frac{1}{3}]$ e $[\frac{2}{3}, 1]$. Ao retirar-se o terço médio destes dois intervalos obtem-se E_2 , o qual contém 4 intervalos $[0, \frac{1}{9}]$, $[\frac{2}{9}, \frac{1}{3}]$, $[\frac{2}{3}, \frac{7}{9}]$, $[\frac{8}{9}, 1]$. Segue-se este processo, até E_k , que é obtido com a retirada dos terços médios de cada intervalo de E_{k-1} . Então E_k consiste de 2^k intervalos, cada um com comprimento 3^{-k} . O conjunto do terço médio de Cantor F consiste dos números que estão em E_k para todo k ; matematicamente F é a intersecção $\bigcap_{k=0}^{\infty} E_k$. O conjunto de Cantor F pode ser pensado como o limite da sequência de conjuntos E_k quando k tende a infinito.

De relance parece que retiramos muito do intervalo $[0, 1]$ durante a construção de F , e que nada permanece. Mas F é um conjunto infinito e incontável, que contém infinitos números na vizinhança de cada um de seus pontos. O conjunto do terço médio de Cantor F consiste precisamente desses números em $[0, 1]$ cuja expansão em base 3 não contém o dígito 1, ou seja, todos os números $a_1 3^{-1} + a_2 3^{-2} + a_3 3^{-3} + \dots$ com $a_i = 0$ ou 2 para cada i . Para ver isto, note que para chegar em E_1 de E_0 remove-se todos os números com $a_i = 1$, e de E_1 para E_2 remove-se todos os números com $a_2 = 1$, e assim por diante.

A seguir, algumas características do conjunto do terço médio de Cantor F , em muito fractais são encontradas características similares.

- (i) F é auto-similar. As partes de F nos intervalos $[0, \frac{1}{3}]$ e $[\frac{2}{3}, 1]$ são geometricamente similares a F , escalonado por um fator de $\frac{1}{3}$. E novamente, as partes de F nos quatro intervalos de E_2 são similares a F , mas escalonados por um fator de $\frac{1}{9}$ e assim por diante. O conjunto de Cantor contém cópias de si mesmo em diferentes escalas.
- (ii) O conjunto F contém uma estrutura fina, isto é, contém detalhes em escalas pequenas. Quanto mais aumentarmos a imagem do conjunto de Cantor, mais intervalos se tornam aparentes.
- (iii) Embora F tenha uma estrutura detalhada, a definição atual de F é bem direta.
- (iv) F é obtido por um procedimento de repetição. Sua construção consiste em remover repetidamente o terço médio dos intervalos. As etapas sucessivas dão boas aproximações de E_k para o conjunto F .
- (v) A geometria de F não é facilmente descrita em termos clássicos: não é o lugar geométrico dos pontos que satisfazem alguma condição geométrica simples, nem é o conjunto de soluções de qualquer equação simples.
- (vi) É difícil descrever a geometria local de F : perto de cada um de seus pontos, há um grande número de pontos, separados por intervalos de comprimentos variados.
- (vii) Embora F seja de certa forma um conjunto grande, o seu tamanho não é quantificável pelos meios habituais. Obtemos o comprimento restante em cada nível como a soma dos comprimentos dos segmentos que permanecem:

$$\text{nível } 0: l_0 = 1$$

nível 1: $l_1 = 2/3$
 nível 2: $l_2 = 4/9$
 nível 3: $l_3 = 8/27$

 nível k : $l_k = (2/3)^k$

de modo que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} l_k = 0$$

ou seja, o comprimento restante tende a se anular quando $k \rightarrow \infty$.

O próximo exemplo é a curva de Koch, ver figura (2.4). Seja E_0 um segmento de reta unitário. O conjunto E_1 consiste de 4 segmentos obtidos pela remoção do terço médio de E_0 , o qual é substituído por dois lados de um triângulo equilátero com base no segmento removido. A construção de E_2 se dá pela aplicação do mesmo procedimento para cada segmento em E_1 e assim por diante. Então E_k é obtido substituindo o terço médio de cada segmento de E_{k-1} por dois lados de um triângulo equilátero. Quando k é grande, a curva E_{k-1} e E_k diferem apenas em detalhes finos, e quando k tende a infinito, a sequência de curvas poligonais E_k aproxima-se da curva limitada F , chamada curva de Koch.

A curva de Koch contém características muito semelhantes aquelas listadas para o terço médio de Cantor. É constituída de partes, cada uma semelhante a anterior, mas reduzida por um fator de escala $\frac{1}{3}$. A estrutura fina é refletida nas irregularidades em todas as escalas; mesmo assim a estrutura intrincada deriva de uma construção simples. Enquanto podemos chamar F de curva, é muito irregular para ter tangentes no sentido clássico. Um simples cálculo nos mostra que o comprimento de E_k é dado por $(\frac{4}{3})^k$, sendo que k tendendo ao infinito implica que F tem comprimento infinito. Por outro lado, F ocupa uma área nula no plano, por isso nem a área nem o comprimento nos dão uma descrição muito útil a respeito do tamanho de F .

Muitos outros conjuntos podem ser construídos a partir do procedimento de repetição. Por exemplo o triângulo de *Sierpinski*, ver figura (2.5), que é obtido pela remoção repetida de triângulos equiláteros de um triângulo equilátero inicial com lado de comprimento unitário. Pode-se pensar este procedimento como a substituição repetida de um triângulo equilátero por três triângulos com metade da altura.

A figura (2.6) mostra um plano análogo ao conjunto de Cantor a poeira de Cantor. Em cada estágio, cada quadrado restante é dividido em 16 quadrados menores, dos quais 4 são mantidos e o restante é descartado.

Todos estes exemplos contém propriedades similares as mencionadas no conjunto de Cantor e a curva de Koch. Há muitos outros tipos de construção. O conjunto de Júlia, ver figura (2.7), possui um estrutura altamente complexa, deriva da função quadrática $f(z) = z^2 + c$ para uma constante adequada c . Embora este conjunto não seja estritamente auto-similar como o conjunto de Cantor e a curva de Koch são, ele é "quase-auto-similar" em que pequenas porções

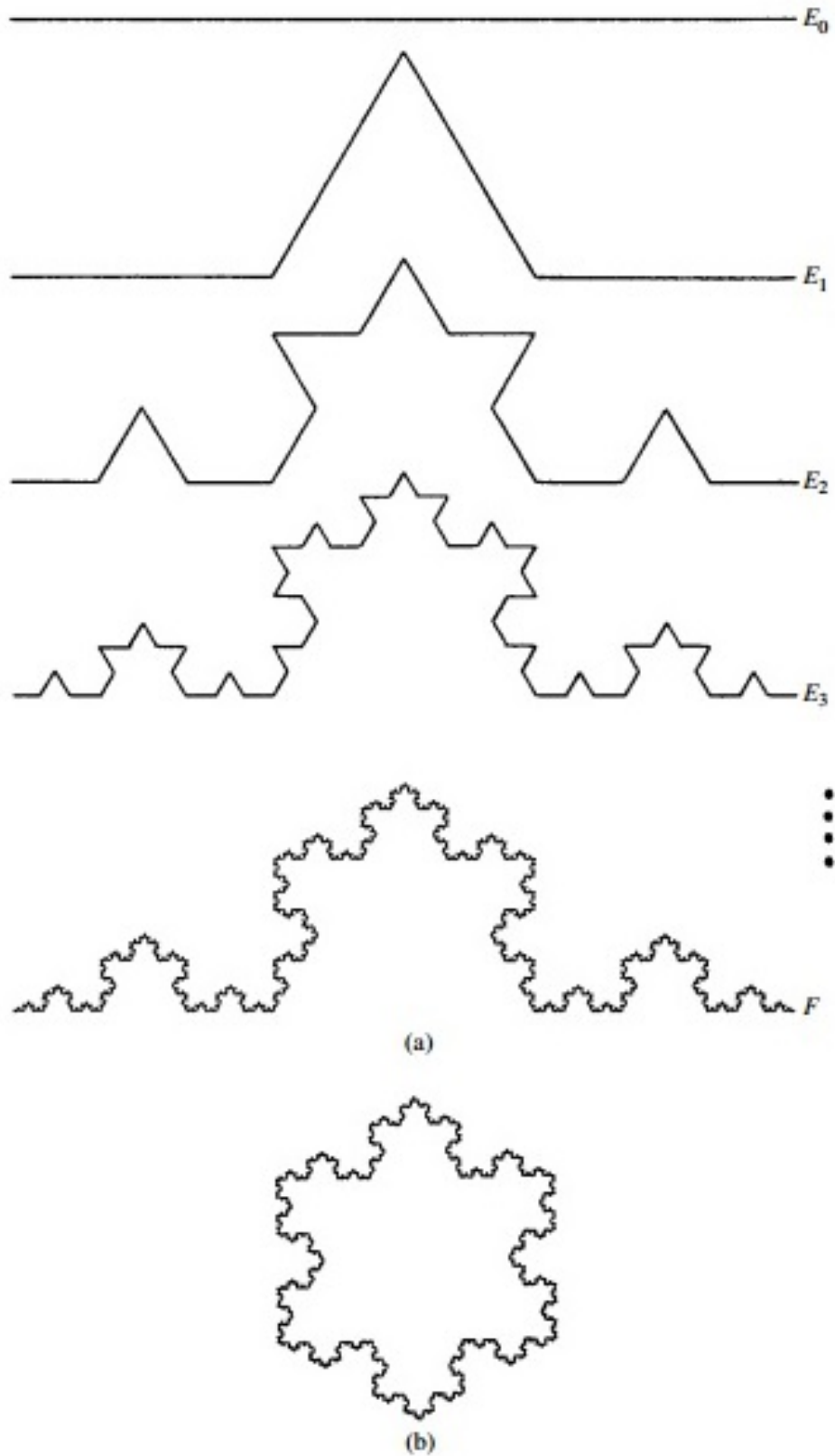


Figura 2.4: (a) Construção da curva de Koch F . A cada estágio o terço médio de cada segmento é substituído por dois lados de um triângulo equilátero baseado no segmento retirado. (b) Três curvas de Koch colocadas juntas para formar a curva snowflake. Fonte: [25]

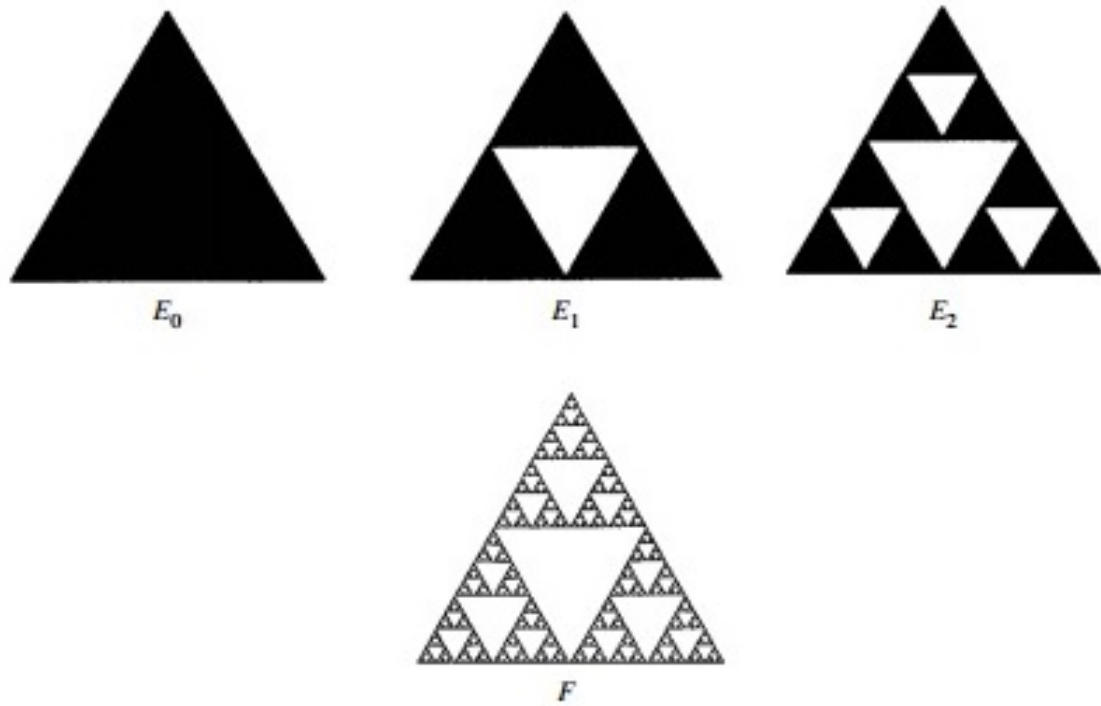


Figura 2.5: Construção do triângulo de Sierpinski ($\dim_H F = \dim_B F = \log 3 / \log 2$) Fonte: [25]

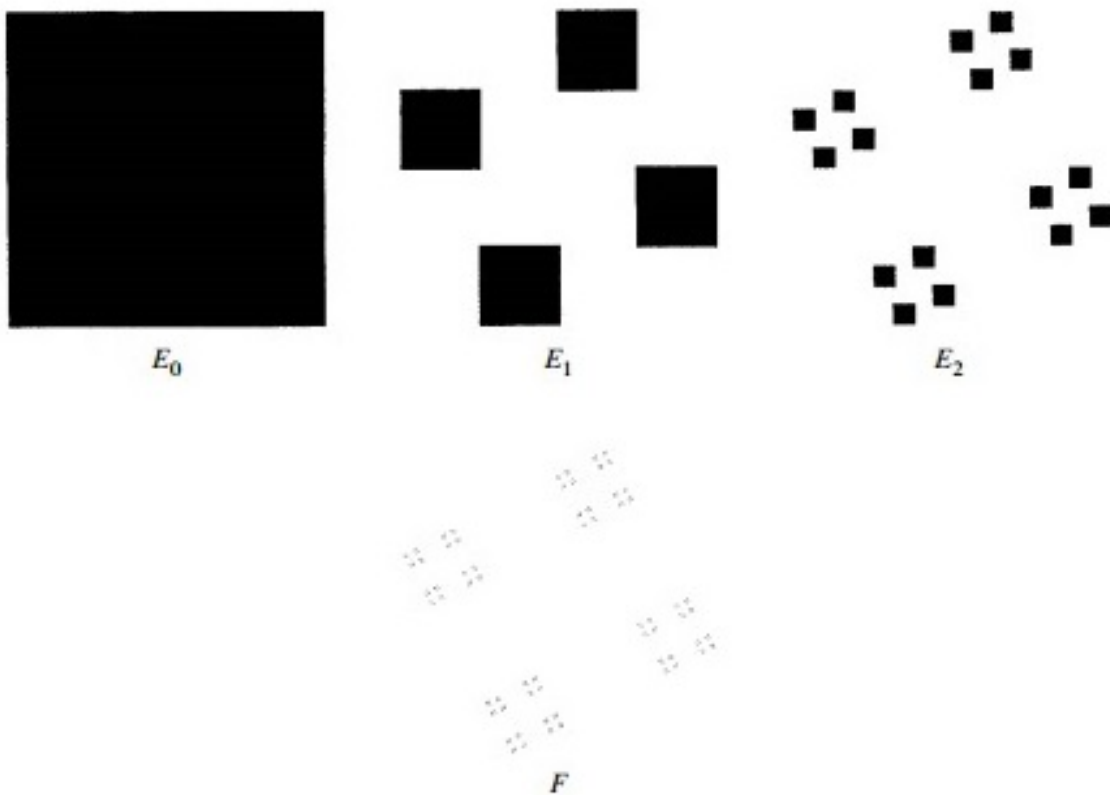


Figura 2.6: Construção da poeira de Cantor ($\dim_H F = \dim_B F = 1$) Fonte: [25]

do conjunto podem ser ampliadas e suavemente distorcidas de modo a coincidir com uma grande parte do conjunto.

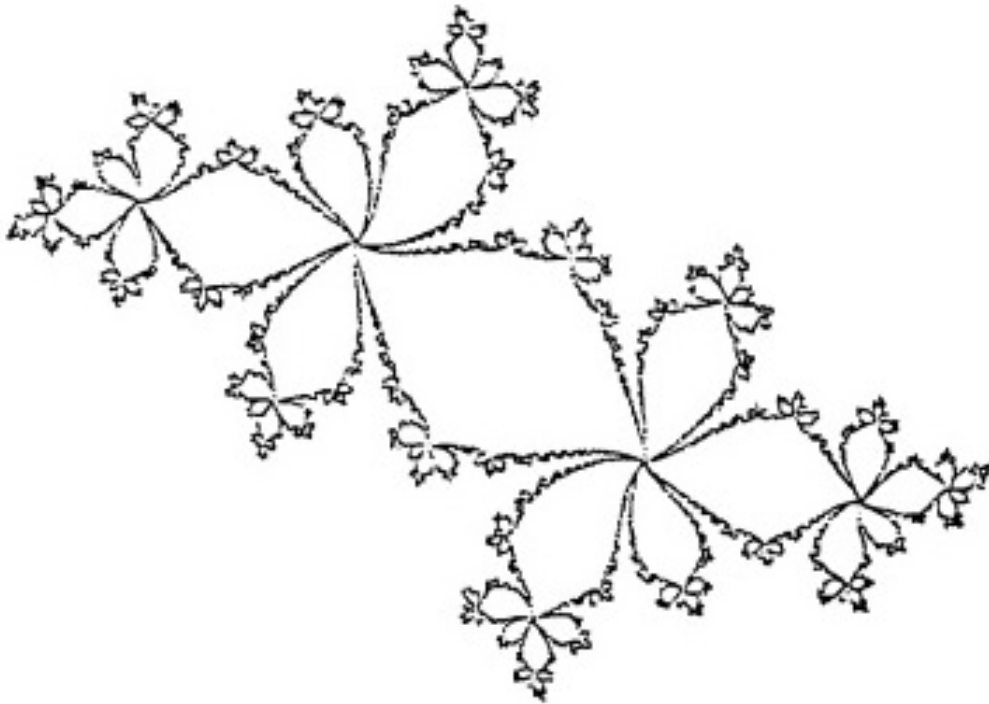


Figura 2.7: Conjunto de Julia. Fonte [25]

Todos estes exemplos são referidos como fractais, as propriedades que foram listadas para o conjunto de Cantor são as características dos fractais. Certamente qualquer fractal possui a estrutura fina, ou seja, seu grau de detalhamento não diminui ao examinarmos uma porção pequena do mesmo. Sua imagem no entanto está sujeita a um limite de detalhamento imposto pelo poder de resolução do meio no qual se faz sua representação. As figuras geométricas tradicionais não possuem essa característica, pois o grau de detalhamento cai consideravelmente ao fazermos um exame microscópico em um intervalo cada vez menor. Muitos fractais possuem um certo grau de auto-similaridade, onde uma parte do fractal se assemelha a uma parte maior, ou ao fractal inteiro. Alguns fractais possuem uma auto-similaridade estrita, ou seja, quando uma porção do fractal reproduz exatamente a forma de uma porção maior, também podem ter auto-similaridade estocástica, isto é, caracterizada estatisticamente, podem ter a mesma distribuição, média ou desvio padrão.

Os métodos de geometria clássica e do cálculo clássico são inadequados para estudar fractais, por isso é necessário o estudo de técnicas alternativas. A principal ferramenta da geometria fractal é a dimensão em muitas formas. É familiar a ideia de que uma curva (suave), é um objeto de uma dimensão, e que uma superfície possui duas dimensões, já o conjunto de Cantor possui dimensão $\frac{\log 2}{\log 3} = 0,631\dots$ e a curva de Koch possui dimensão $\frac{\log 4}{\log 3} = 1,262\dots$, é maior do que uma dimensão porque tem comprimento infinito e menor do que duas dimensões porque possui área zero.

A noção de dimensão é central para a geometria fractal, a dimensão indica quanto espaço um conjunto ocupa perto de cada um de seus pontos. Existe uma grande variedade de dimensões fractais em uso, porém a dimensão de Hausdorff é a mais antiga e a mais importante, pois tem a vantagem de ser definida para qualquer conjunto, e é matematicamente conveniente, por ser baseada em medidas que são relativamente fáceis de manipular. A principal desvantagem, é que em muitos casos, é difícil calcular ou estimar por métodos computacionais. No entanto, para uma compreensão da matemática dos fractais é necessário familiarizar-se com a medida e dimensão de Hausdorff.

2.3.3.1 Medida de Hausdorff Se U é qualquer subconjunto não vazio do espaço Euclidiano n -dimensional, \mathbb{R}^n , o diâmetro de U é definido como $|U| = \sup\{|x - y| : x, y \in U\}$, ou seja, a maior distância entre qualquer par de pontos de U . Se U_i é uma coleção contável ou finita de conjuntos de diâmetro ao menos δ que cobre F , isto é, $F \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} U_i$ com $0 \leq |U_i| \leq \delta$ para cada i , dizemos que $\{U_i\}$ é a δ -cobertura de F [25].

Suponha que F é um subconjunto de \mathbb{R}^n e s é um número não-negativo. Para qualquer $\delta > 0$ definimos:

$$\mathcal{H}_\delta^s(F) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} |U_i|^s : \{U_i\} \text{ é a } \delta\text{-cobertura de } F \right\}. \quad (2.10)$$

Olha-se todas as coberturas de F por um conjunto de diâmetros ao menos δ procurando minimizar a soma dos diâmetros, ver figura (2.8). Conforme δ diminui, as coberturas admissíveis de F são reduzidas. Portanto, o ínfimo $\mathcal{H}_\delta^s(F)$ aumenta, e se aproxima de um limite quando $\delta \rightarrow 0$. Escreve-se:

$$\mathcal{H}^s(F) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{H}_\delta^s(F) \quad (2.11)$$

Este limite existe para qualquer subconjunto F de \mathbb{R}^n , embora seu valor seja normalmente 0 ou ∞ . Chamamos $\mathcal{H}^s(F)$ a medida s -dimensional de Hausdorff de F . Temos que $\mathcal{H}^s(\emptyset) = 0$, e se E está contido em F então $\mathcal{H}^s(E) \leq \mathcal{H}^s(F)$, e ainda se F_i é qualquer coleção de conjuntos contáveis, então:

$$\mathcal{H}^s \left(\bigcup_{i=1}^{\infty} F_i \right) \leq \sum_{i=1}^{\infty} \mathcal{H}^s(F_i). \quad (2.12)$$

A medida de Hausdorff generaliza a ideia de comprimento, área, volume, etc. É possível mostrar que, para subconjuntos de \mathbb{R}^n , a medida de Hausdorff n -dimensional é, com um múltiplo constante, a medida de Lebesgue n -dimensional, isto é, o usual volume n -dimensional. Mais precisamente se F é um subconjunto de Borel de \mathbb{R}^n , então:

$$\mathcal{H}^n(F) = c_n^{-1} \text{vol}^n(F) \quad (2.13)$$

onde c_n é o volume de uma bola n -dimensional de diâmetro 1, só que $c_n = \pi^{n/2}/2^n(n/2)!$



Figura 2.8: Conjunto F e duas δ -coberturas possíveis para F . O ínfimo do $\sum |U_i|^s$ sobre todas as δ -coberturas $\{U_i\}$ nos dá $\mathcal{H}_\delta^s(F)$. Fonte: [25]

se n é par e $c_n = \pi^{(n-1)/2}((n-1)/2)!/n!$ se n é ímpar. Similarmente, para subconjuntos de \mathbb{R}^n de dimensões menores, temos que $\mathcal{H}^0(F)$ é o número de pontos em F ; $\mathcal{H}^1(F)$ nos dá o comprimento de uma curva suave F ; $\mathcal{H}^2(F) = (4/\pi) \times \text{area}(F)$ se F é uma superfície suave; $\mathcal{H}^3(F) = (6/\pi) \times \text{vol}(F)$; e $\mathcal{H}^m(F) = c_m^{-1} \times \text{vol}^m(F)$ se F é uma superfície m -dimensional no sentido clássico.

As propriedades de escala de comprimento, área e volume são bem conhecidas, na ampliação por um fator λ , o comprimento da curva é multiplicado por λ , a área de uma região plana é multiplicada por λ^2 e o volume de um objeto tridimensional é multiplicado por λ^3 . A figura (2.9) mostra as escalas de medidas de Hausdorff s -dimensional com um fator λ^s .

2.3.3.2 Dimensão de Hausdorff Retornando a medida de Hausdorff (2.10), é possível ver que dado qualquer conjunto $F \subset \mathbb{R}^n$ e $\delta < 1$, $\mathcal{H}_\delta^s(F)$ é não-crescente com s , então por (2.11), $\mathcal{H}^s(F)$ é também não-crescente. Se $t > s$ e $\{U_i\}$ é a δ -cobertura de F temos que:

$$\sum_i |U_i|^t \leq \sum_i |U_i|^{t-s} |U_i|^s \leq \delta^{t-s} \sum_i |U_i|^s \quad (2.14)$$

então, tomando o ínfimo, $\mathcal{H}_\delta^t(F) \leq \delta^{t-s} \mathcal{H}_\delta^s(F)$. Seja $\delta \rightarrow 0$ vemos que se $\mathcal{H}^s(F) < \infty$ então $\mathcal{H}^t(F) = 0$ para $t > \delta$. A figura (2.10) mostra o gráfico de $\mathcal{H}^s(F)$ em comparação a s , note que existe um valor crítico de s onde $\mathcal{H}^s(F)$ salta de ∞ para 0. Este valor crítico é chamado

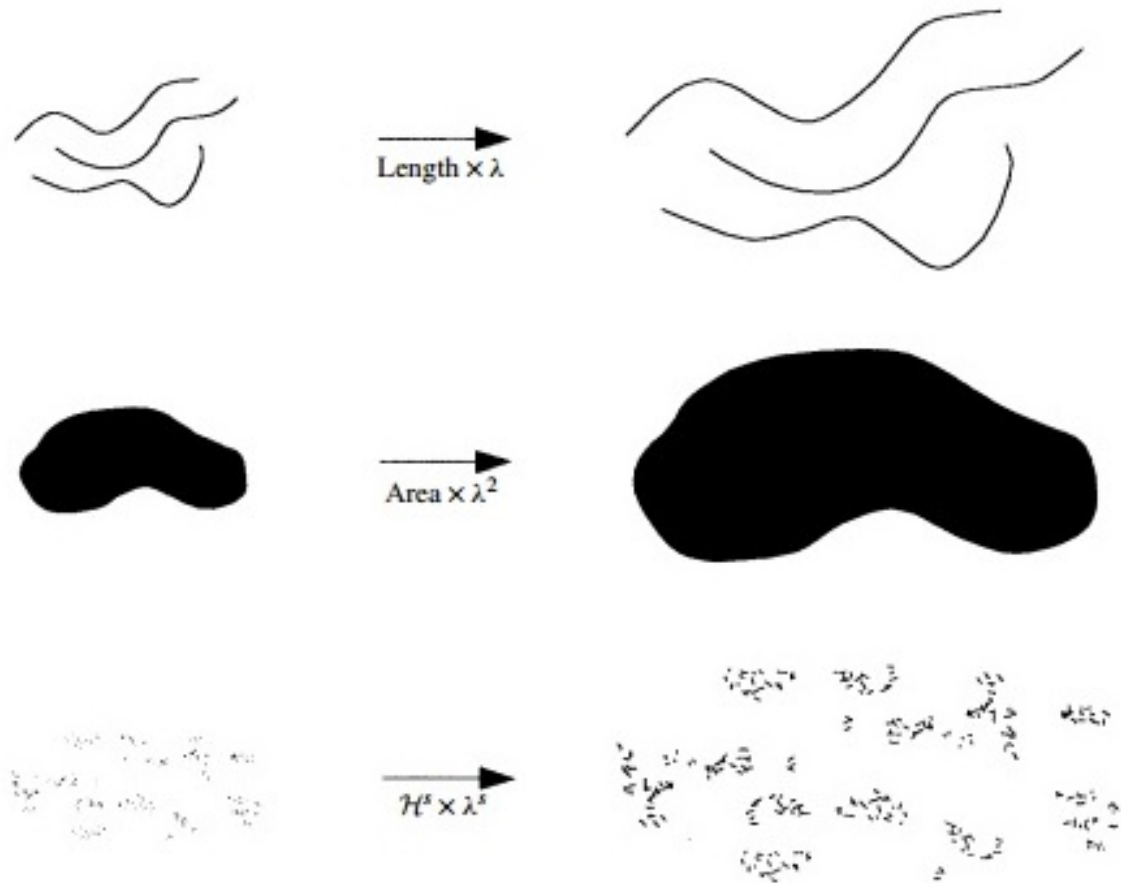


Figura 2.9: Escalonando conjuntos por um fator λ aumentamos o comprimento por um fator λ , a área por λ^2 e uma medida de Hausdorff s -dimensional por λ^s Fonte: [25]

de dimensão de Hausdorff de F , e escrevemos $\dim_H F$ e está definido para qualquer conjunto $F \subset \mathbb{R}^n$. Formalmente

$$\dim_H F = \inf\{s \geq 0 : \mathcal{H}^s(F) = 0\} = \sup\{s : \mathcal{H}^s(F) = \infty\} \quad (2.15)$$

(tomando o supremo do conjunto vazio sendo zero), de modo que

$$\mathcal{H}^s(F) = \begin{cases} \infty & \text{se } 0 \leq s < \dim_H F \\ 0 & \text{se } s > \dim_H F. \end{cases} \quad (2.16)$$

Se $s = \dim_H F$, então $\mathcal{H}^s(F)$ pode ser zero ou infinito, ou satisfaz

$$0 < \mathcal{H}^s(F) < \infty.$$

Veja alguns exemplos de como calcular a dimensão de Hausdorff de alguns fractais mencionados anteriormente:

Exemplo 1

Seja F o conjunto da poeira de Cantor, ver figura (2.6), construído a partir de um quadrado

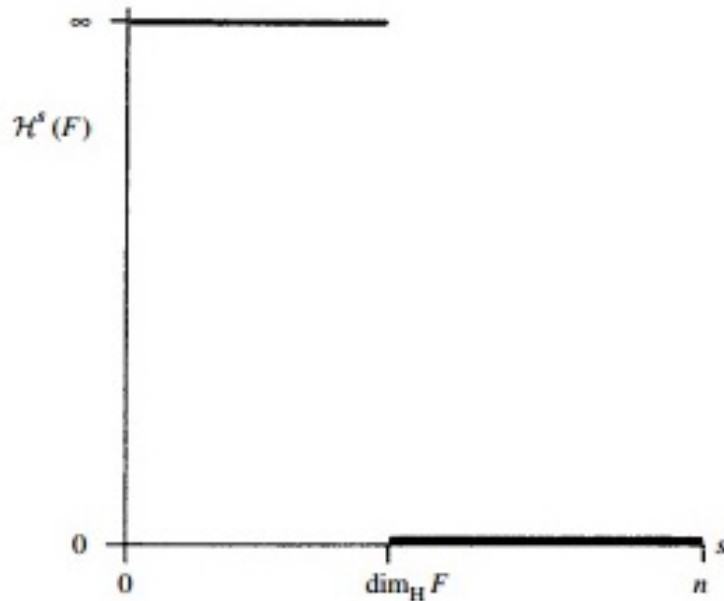


Figura 2.10: Gráfico de $\mathcal{H}^s(F)$ em comparação a s para um conjunto F . A dimensão de Hausdorff é o valor de s quando o salto de ∞ para 0 ocorre. Fonte: [25]

unitário. Então $1 \leq \mathcal{H}^1 \leq \sqrt{2}$, a $\dim_H F = 1$

Cálculo: Observe que E_k , o k -ésimo estágio de construção, consiste de 4^k quadrados de lado 4^{-k} e assim o diâmetro é $4^{-k}\sqrt{2}$. Tomando os quadrados de E_k como as δ -coberturas de F onde $\delta = 4^{-k}\sqrt{2}$, obtem-se uma estimativa $\mathcal{H}_\delta^1(F) \leq 4^k 4^{-k}\sqrt{2}$ para o ínfimo em (2.10). $\delta \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$, e então $\mathcal{H}^1(F) \leq \sqrt{2}$

Exemplo 2

Seja F o conjunto do terço médio de Cantor, ver figura (2.3). Se $s = \log 2 / \log 3 = 0.6309\dots$ então $\dim_H F = s$ e $\frac{1}{2} \leq \mathcal{H}^s(F) \leq 1$.

Cálculo Eurístico: O conjunto de Cantor F é dividido em duas partes, parte esquerda $F_L = F \cap [0, \frac{1}{3}]$ e a direita $F_R = F \cap [\frac{2}{3}, 1]$. Ambas as partes são geometricamente similares a F reduzidas por um fator de escala $\frac{1}{3}$, e $F = F_L \cup F_R$ que é uma união disjunta. Para qualquer s :

$$\mathcal{H}^s(F) = \mathcal{H}^s(F_L) + \mathcal{H}^s(F_R) = \left(\frac{1}{3}\right)^s \mathcal{H}^s(F) + \left(\frac{1}{3}\right)^s \mathcal{H}^s(F)$$

Assumindo que o valor crítico $s = \dim_H F$ tem-se que $0 < \mathcal{H}^s(F) < \infty$, pode-se dividir por $\mathcal{H}^s(F)$ para obter $1 = 2\left(\frac{1}{3}\right)^s$ ou $s = \log 2 / \log 3$.

Cálculo Rigoroso: Chama-se os intervalos que compõem os conjuntos E_k na construção de F de intervalos nível- k . Então E_k consiste de 2^k intervalos nível- k cada um com comprimento 3^{-k} . Toma-se os intervalos de E_k como a 3^{-k} -cobertura F que dá $\mathcal{H}_{3^{-k}}^s(F) \leq 2^k 3^{-ks} = 1$ se $s = \log 2 / \log 3$. Quando $k \rightarrow \infty$ dá $\mathcal{H}^s(F) \leq 1$.

Para provar que $\mathcal{H}^s(F) \geq \frac{1}{2}$ temos que mostrar que:

$$\sum |U_i|^s \geq \frac{1}{2} = 3^{-s} \quad (2.17)$$

para cada cobertura $\{U_i\}$ de F . Se $\{U_i\}$ é uma coleção finita de subintervalos fechados de $[0, 1]$, para cada U_i , seja k um inteiro tal que:

$$3^{-(k+1)} \leq |U_i| < 3^{-k}. \quad (2.18)$$

Então U_i pode interceptar ao menos um intervalo k -nível desde que a separação destes intervalos k -nível são ao menos 3^{-k} . Se $j \geq k$ então, pela construção, U_i intercepta ao menos $2^{j-k} = 2^j 3^{-sk} \leq 2^j 3^s |U_i|^s$ intervalos nível- j de E_j . Se escolhermos j grande o suficiente para que $3^{-(j+1)} \leq |U_i|$ para todo U_i , então, desde que $\{U_i\}$ intercepte todos 2^j intervalos básicos de comprimento 3^{-j} , contando os intervalos temos $2^j \leq \sum_i 2^j 3^s |U_i|^s$.

2.4 Derivada Métrica

Nesta seção define-se o conceito de derivada métrica, esta derivada possui grande potencial de aplicação para o estudo de sistemas complexos e de fenômenos definidos em domínios fractais.

Porém antes é preciso relembrar alguns conceitos do cálculo clássico. Sabe-se do cálculo usual que a derivada de uma função $f(x)$ no ponto x_0 , denotada por $f'(x_0)$ é definida pelo limite

$$f'(x_0) = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}, \quad (2.19)$$

onde Δx está relacionado à métrica euclidiana $|x_1 - x_0|$ por

$$\Delta x = \begin{cases} |x_1 - x_0| & \text{se } x_0 \leq x_1 \\ -|x_1 - x_0| & \text{se } x_0 > x_1. \end{cases}$$

Uma função $f(x)$ é dita diferenciável em x_0 se o limite (2.19) existir. A existência deste limite implica que qualquer função pode ser aproximada por uma função linear cujo coeficiente linear é a derivada $f'(x_0)$.

Teorema 2.1 (LEMA FUNDAMENTAL DA DIFERENCIAÇÃO). [26] *Suponha que $f(x)$ é uma função contínua que tem derivada em x_0 . Então existe uma função $\eta(\Delta x)$ definida em um intervalo contendo 0 tal que $f(x_0 + \Delta x) - f(x_0) = [f'(x_0 + \eta(\Delta x))]\Delta x$, onde $\eta(\Delta x)$ é contínua em 0 com $\eta(0) = 0$.*

Demonstração. Para provar o teorema basta verificar que podemos definir $\eta(\Delta x)$ como:

$$\eta(\Delta x) = \begin{cases} \frac{1}{h}[f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)] - f'(x_0) & , \text{ se } \Delta x \neq 0 \\ 0 & , \text{ se } \Delta x = 0. \end{cases}$$

como $f(x)$ tem derivada em x_0 vemos que $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \eta(\Delta x) = 0 = \eta(0)$. Então $\eta(\Delta x)$ é contínua em $\Delta x = 0$. \square

Como consequência desse teorema, temos para $\Delta x \ll 1$ que $f(x_0 + \Delta x) - f(x_0) \approx f'(x_0)\Delta x$, ou seja, $|f(x_1) - f(x_0)| \approx |f'(x_0)||x_1 - x_0|$. Em outras palavras, podemos dizer que se $f(x)$ é uma função diferenciável, então $|f(x_1) - f(x_0)|$ se aproxima de zero quando $x_1 \rightarrow x_0$ proporcionalmente à $|x_1 - x_0|$. A função não será diferenciável em x_0 se, por exemplo, $|f(x_1) - f(x_0)|$ se aproximar de zero mais lentamente que $|x_1 - x_0|$. O que ocorre, por exemplo, quando

$$|f(x_1) - f(x_0)| \approx kd(x_1, x_0), \quad (2.20)$$

onde k é uma constante positiva e

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{d(x_1, x_0)}{|x_1 - x_0|} = \infty \quad (2.21)$$

Um exemplo de função não diferenciável é a função de Weierstrass, ver figura (2.11), expressa da seguinte forma:

$$w(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a^k \cos(2\pi b^k x) \quad (2.22)$$

onde $0 < a < 1 < b$, com $ab \geq 1$.

A função de Weierstrass é contínua em todos os pontos x , pois $w(x) < \sum_{k=0}^{\infty} a^k = \frac{1}{1-a}$, $0 < a < 1$, mas não admite derivada em ponto nenhum. Se derivarmos heurísticamente $w(x)$ teremos $w'(x) = -\sum_{k=0}^{\infty} 2\pi(ab)^k \sin(2\pi b^k x) = \pm\infty$ se $x \neq 0$. Pois neste caso $ab > 1$ e a série é divergente. Podemos mostrar rigorosamente que a derivada não existe para qualquer $x \in \mathbb{R}$. Isto está relacionado ao fato que $w(x_1) - w(x_0)$ não se aproxima de zero de forma proporcional à $(x_1 - x_0)$.

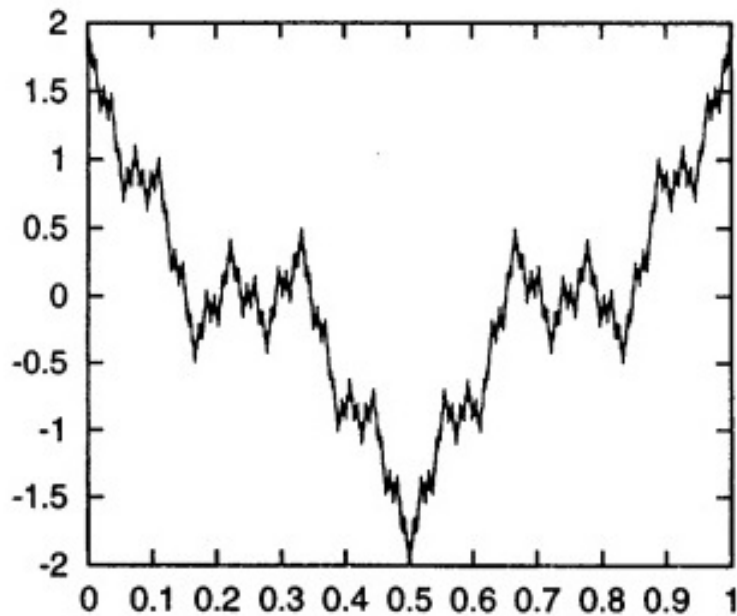


Figura 2.11: Gráfico de $w(x)$ com $a = 0.5$ e $b = 3$. Fonte: [27]

Além disso, o gráfico desta função tem dimensão fractal, se fizermos uma transformação de escala $x \rightarrow bx$, teremos:

$$\begin{aligned} w(bx) &= \frac{1}{a} \sum_{k=0}^{\infty} a^{k+1} \cos(2\pi b^{k+1} x) = \frac{1}{a} \sum_{k=1}^{\infty} a^k \cos(2\pi b^k x) \\ &= \frac{1}{a} \sum_{k=0}^{\infty} a^k \cos(2\pi b^k x) - \frac{\cos(2\pi x)}{a} \end{aligned} \quad (2.23)$$

portanto,

$$w(bx) = \frac{w(x)}{a} - \frac{\cos(2\pi x)}{a} \quad (2.24)$$

Após esta transformação podemos ver que o gráfico da função difere do gráfico original por

uma função contínua $\left(\frac{\cos(2\pi x)}{a}\right)$ e por um fator de escala $\frac{1}{a}$. Como consequência, o gráfico de $w(x)$ é auto-similar, tendo um comportamento fractal e sua dimensão, conforme [27], é:

$$D = 2 + \frac{\log a}{\log b}.$$

Note que $1 < D < 2$ se $ab > 1$, se $a = 0.5$ e $b = 3$. Neste caso $D = 2 - \log 2 / \log 3 \approx 1.37$.

Voltando ao caso de funções diferenciáveis, pode-se dizer que $|f(x_1) - f(x_0)| \propto k|x_1 - x_0|$ quando $\Delta x \ll 1$. Porém em objetos fractais esta proporcionalidade pode não ocorrer, por isso é preciso definir uma variação Δ_x^H com uma métrica diferente:

$$\Delta_x^H = \begin{cases} d(x_1, x_0) & \text{se } x_0 \leq x_1 \\ -|d(x_1, x_0)| & \text{se } x_0 > x_1. \end{cases}$$

Com essa variação é possível definir a derivada métrica.

Definição 2.2. *Seja $f(x)$ uma função definida em $D \in \mathbb{R}$, e seja $d(x_1, x_0)$ uma métrica em D , chama-se de derivada métrica em x_0 o limite:*

$$\frac{d^H f(x_0)}{d^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta_x^H},$$

quando este limite existir a função $f(x)$ é dita H -derivável em x_0 .

No caso da função $f(x)$ ser diferenciável, a derivada métrica se relaciona à derivada usual. Temos:

Corolário 2.3. *Se $f(x)$ é diferenciável, então:*

$$\frac{d^H f(x_0)}{d^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta_x^H} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \frac{x_1 - x_0}{\Delta_x^H} = f'(x) \frac{d^H x}{d^H x}$$

É preciso salientar que $\frac{d^H x}{d^H x}$ não é necessariamente igual a 1, depende da métrica utilizada.

Assim como no cálculo usual, as derivadas métricas também possuem regras de derivação, ver Apêndice (1).

2.5 Derivada de Hausdorff

Fractais tem atraído grande atenção em diversos campos desde seu começo. Nas décadas recentes, o cálculo fracionário tornou-se muito popular na modelagem de difusão anômala. O cálculo fracionário é de fato um operador integro-diferencial e pode descrever muito bem alguns comportamentos não-locais. Mas esta metodologia tem custos computacionais muito altos. Como uma abordagem alternativa ao cálculo fracionário, a derivada de Hausdorff é apresentada como um operador para superar o alto custo computacional das derivadas fracionárias não-locais. Nota-se que a ordem da derivada de Hausdorff tem claro significado físico e está diretamente relacionada com a dimensão fractal, conforme [28]. Uma análise rigorosa é provida em [29]. As derivadas de Hausdorff tem sido, nos últimos anos, amplamente usada em vários problemas complexos, como difusão anômala, imagem de ressonância magnética, condução de calor e economia [28].

Considerando uma partícula em movimento em termos de tempo fractal, a distância do movimento pode ser calculada por

$$l(\tau) = v(\tau - t_0)^\alpha, \quad (2.25)$$

onde l é a distância, v é a velocidade uniforme, τ o instante de tempo corrente, t_0 é o instante inicial, α a dimensionalidade fractal no tempo. Quando a velocidade varia com o tempo, a distância integral de Hausdorff é dada por

$$l(t) = \int_{t_0}^t v(\tau) d(\tau - t_0)^\alpha. \quad (2.26)$$

Podemos derivar a derivada de Hausdorff da expressão 2.26

$$\frac{dl}{dt^\alpha} = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{l(t) - l(t')}{(t - t_0)^\alpha - (t' - t_0)^\alpha} = \frac{1}{\alpha(t - t_0)^{\alpha-1}} \frac{dl}{dt} = \frac{(t - t_0)^{1-\alpha}}{\alpha} \frac{dl}{dt} \quad (2.27)$$

Seja o instante t_0 igual a zero, tem-se:

$$\frac{dl}{dt^\alpha} = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{l(t) - l(t')}{t^\alpha - t'^\alpha} = \frac{1}{\alpha t^{\alpha-1}} \frac{dl}{dt} \quad (2.28)$$

Por analogia com a derivada de Hausdorff com relação ao tempo, a derivada de Hausdorff no espaço é dada por:

$$\frac{du}{dx^\beta} = \lim_{x' \rightarrow x} \frac{u(x) - u(x')}{x^\beta - x'^\beta} = \frac{1}{\beta x^{\beta-1}} \frac{du}{dx} \quad (2.29)$$

onde β representa a dimensão fractal de Hausdorff no espaço. Note que a origem no sistema espacial de coordenadas da expressão 2.29 é assumida como zero.

O conceito de métrica fractal espaço-tempo em uma dimensão topológica em meio fractal usada é:

$$\begin{cases} \Delta \hat{t} = \Delta t^\alpha \\ \Delta \hat{x} = \Delta x^\beta. \end{cases} \quad (2.30)$$

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Uma equação para a distribuição espacial da concentração de contaminantes na CLP pode ser obtida pela aplicação do princípio da continuidade ou conservação de massa [17, 30, 31]:

$$\frac{D\bar{c}}{Dt} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\Pi}_c = 0 \quad (3.1)$$

onde $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}$ é a derivada Lagrangeana, $\bar{c} = \bar{c}(x, y, z, t)$ é a concentração média, \vec{u} é a velocidade do vento e Π_c é o fluxo de concentração.

Considerando o caso estacionário, ou seja, a derivada da concentração em relação ao tempo é nula,

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = 0, \quad (3.2)$$

e escolhendo um sistema de coordenadas cartesianas na qual a direção longitudinal x coincide com a direção do vento médio, podemos desprezar a difusão longitudinal e os termos advectivos nas direções y e z . Neste caso a equação (3.1) torna-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}(\Pi_{c,y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\Pi_{c,z}) = 0 \quad (3.3)$$

onde $\Pi_{c,y}$ e $\Pi_{c,z}$ são as componentes do fluxo de concentração nas direções y e z , respectivamente.

Nos modelos clássicos [3] os fluxos de concentração são parametrizados da seguinte forma:

$$\Pi_{c,y} = -k_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \quad e \quad \Pi_{c,z} = -k_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (3.4)$$

Logo a equação (3.3) torna-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (3.5)$$

Integrando a equação (3.5) ao longo do eixo y , obtém-se uma equação para a concentração integrada $\bar{c}^y(x, z)$

$$\bar{c}^y(x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{c}(x, y, z) dy \quad (3.6)$$

neste caso a equação (3.5) torna-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} \right) \quad (3.7)$$

pois o fluxo de concentração média é nulo no infinito.

Em um processo governado por um regime de estado estacionário da equação de difusão-advectação (3.7) com k_z constante é chamada de processo Gaussiano, que com as condições de

contorno $\overline{c^y} = \lim_{x \rightarrow 0^+} \overline{c^y}(x, z) = \delta(z)$, no domínio $0 \leq x < \infty$ e $-\infty < z < \infty$ apresenta uma solução dada por:

$$\overline{c^y}(x, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi K_z x}} \exp\left(\frac{-z^2}{4K_z x}\right) \quad (3.8)$$

Neste trabalho, para introduzir a derivada fracionária de Hausdorff no termo difusivo, parametriza-se o fluxo de concentração da seguinte forma:

$$\Pi_{c,z} = -k_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z^\alpha} \quad (3.9)$$

onde $\frac{\partial}{\partial z^\alpha}$ é a derivada de Hausdorff (2.29). Emprega-se a derivada fracionária de Hausdorff no termo advectivo para que o deslocamento quadrático médio da concentração seja uma potência fracionária da distância. Esta é uma característica de um escoamento onde ocorra difusão anômala, [32].

Desta forma a equação (3.7) torna-se:

$$u \frac{x^{1-\alpha}}{\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{z^{1-\alpha}}{\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial z} \right) \quad (3.10)$$

multiplicando por α em ambos os lados:

$$u x^{1-\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial x} = k \frac{\partial}{\partial z} \left(z^{1-\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial z} \right) \quad (3.11)$$

multiplicando por $\frac{1}{u}$ e substituindo $\frac{k}{u}$ por ρ :

$$x^{1-\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial x} = \rho \frac{\partial}{\partial z} \left(z^{1-\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial z} \right) \quad (3.12)$$

e finalmente, aplicando a regra da cadeia no lado direito da igualdade, a equação de difusão-advectação empregando as derivadas de Hausdorff é obtida:

$$x^{1-\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial x} = \rho \left(z^{1-\alpha} \frac{\partial^2 \overline{c^y}}{\partial z^2} + (1-\alpha) z^{-\alpha} \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial z} \right) \quad (3.13)$$

Para que a equação (3.13) descreva um processo de dispersão de contaminantes na Camada Limite Convectiva (CLC) é necessário impor a condição de fronteira de fluxo zero na superfície ($z = 0$) e no topo da camada ($z = h$). Além disso se considera que o contaminante é emitido a partir de uma fonte pontual localizada em uma altura H_s da superfície, com uma razão de emissão Q :

$$K_z \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial z^\alpha} = 0, \quad z = 0, \quad z = h, \quad (3.14)$$

$$u \overline{c^y}(0, z) = Q \delta(z - H_s), \quad x = 0, \quad (3.15)$$

onde $\delta(\cdot)$ é a função delta de Dirac.

Para a equação (3.13) considera-se o método de separação de variáveis, supondo que a solução seja da forma:

$$\bar{c}^y(x, z) = X(x)Z(z) \quad (3.16)$$

Substituindo (3.16) na equação (3.13):

$$x^{1-\alpha}Z(z)\frac{d}{dx} = \rho Z^{1-\alpha}X\frac{d^2Z(z)}{dz^2} + \rho(1-\alpha)Z^{-\alpha}X\frac{dZ(z)}{dz} \quad (3.17)$$

Multiplica-se a equação (3.17) por $\frac{1}{XZ}$ resulta em:

$$\frac{x^{1-\alpha}}{X}\frac{dX}{dx} = \rho\frac{z^{1-\alpha}}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} + \rho\frac{(1-\alpha)z^{-\alpha}}{Z}\frac{dZ}{dz} \quad (3.18)$$

Então, a equação (3.18) deve ser igual a uma constante, pois, é o único modo de estabelecer uma igualdade entre as derivadas em x e z . Assim, obtem-se:

$$\frac{1}{\rho}\frac{x^{1-\alpha}}{X}\frac{dX}{dx} = \frac{1}{Z}\left(z^{1-\alpha}\frac{d^2Z}{dz^2} + (1-\alpha)z^{-\alpha}\frac{dZ}{dz}\right) = -\lambda^2 \quad (3.19)$$

Geram-se, então, duas equações ordinárias a seguir para $X(x)$ e $Z(z)$:

$$\frac{1}{\rho}\frac{x^{1-\alpha}}{X}\frac{dX}{dx} = -\lambda^2 \quad \Rightarrow \quad x^{1-\alpha}\frac{dX}{dx} + \lambda^2\rho X = 0 \quad (3.20)$$

$$\frac{dX}{dx} + \lambda^2\rho x^{\alpha-1}X = 0 \quad (3.21)$$

e

$$z^{1-\alpha}\frac{d^2Z}{dz^2} + (1-\alpha)z^{-\alpha}\frac{dZ}{dz} + \lambda^2Z = 0 \quad (3.22)$$

ou

$$z^{1-\alpha}Z''(z) + (1-\alpha)z^{-\alpha}Z'(z) + \lambda^2Z(z) = 0 \quad (3.23)$$

Substituindo-se as soluções das equações (3.21) e (3.23) na equação (3.16) obtêm-se o modelo de dispersão de contaminantes proposto neste trabalho.

3.1 Solução da equação (3.21)

Pode-se escrever a equação diferencial ordinária de 1º ordem (3.21) da seguinte forma:

$$\frac{X'(x)}{X(x)} = -\lambda^2 \rho x^{\alpha-1} \quad (3.24)$$

Integra-se em ambos os lados com relação a x :

$$\int \frac{X'(x)}{X(x)} dx = -\lambda^2 \rho \int x^{\alpha-1} d(x) \quad (3.25)$$

Para resolver a primeira integral usa-se a seguinte substituição: $u = X(x)$ e $du = X'(x)dx$, assim:

$$\int \frac{1}{u} du = \log u + C \quad (3.26)$$

e voltando a variável x , a solução da primeira integral fica $\ln X(x) + C$.

A solução da segunda integral aplicando as regras básicas de integração fica:

$$-\lambda^2 \rho \int x^{\alpha-1} d(x) = -\lambda^2 \rho \frac{x^\alpha}{\alpha} + C \quad (3.27)$$

E então

$$\ln X(x) + C = -\lambda^2 \rho \frac{x^\alpha}{\alpha} + C \quad (3.28)$$

Portanto a solução da equação (3.21) é:

$$X(x) = C e^{-\frac{\lambda^2 \rho x^\alpha}{\alpha}} \quad (3.29)$$

3.2 Solução da equação (3.23)

Tem-se a equação diferencial ordinária de 2ª ordem (3.23) dada por:

$$z^{1-\alpha}Z''(z) + (1-\alpha)z^{-\alpha}Z'(z) + \lambda^2Z(z) = 0$$

com as condições de fronteira (3.14) e (3.15).

Para a equação (3.23) usa-se o método de Frobenius, supondo que a solução seja uma série de potência da seguinte forma:

$$Z(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (z^{\alpha+1})^{n+r} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{(\alpha+1)(n+r)} \quad (3.30)$$

Calcula-se a primeira e a segunda derivada de (3.30):

$$Z' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+r)(\alpha+1) z^{(\alpha+1)(n+r)-1} \quad (3.31)$$

$$Z'' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+r)-1] z^{(\alpha+1)(n+r)-2} \quad (3.32)$$

Substitui-se (3.30), (3.31) e (3.32) na equação (3.23):

$$\begin{aligned} & z^{1-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+r)-1] z^{(\alpha+1)(n+r)-2} + \\ & (1-\alpha)z^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+r)(\alpha+1) z^{(\alpha+1)(n+r)-1} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{(\alpha+1)(n+r)} = 0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

ou

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+r)-1] z^{(\alpha+1)(n+r)-(\alpha+1)} + \\ & (1-\alpha) \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+r)(\alpha+1) z^{(\alpha+1)(n+r)-(\alpha+1)} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{(\alpha+1)(n+r)} = 0 \end{aligned} \quad (3.34)$$

Agora, reescrevendo o expoente de z do primeiro e do segundo somatório da equação (3.34) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & (n+r)(\alpha+1) - (\alpha+1) = n\alpha + n + r\alpha + r - \alpha - 1 = \\ & \alpha(n-1) + (n-1) + r(\alpha+1) = (n-1)(\alpha+1) + r(\alpha+1) = (\alpha+1)[(n-1) + r] \end{aligned} \quad (3.35)$$

efetuando a mudança de variável $n \rightarrow n'$ tal que $n' = n-1$ que implica $n = n'+1$ e substituindo em (3.34):

$$\begin{aligned} & \sum_{n'=-1}^{\infty} c_{n'+1}(n'+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n'+1+r)-1]z^{(\alpha+1)(n'+r)} + \\ (1-\alpha) & \sum_{n'=-1}^{\infty} c_{n'+1}(n'+1+r)(\alpha+1)z^{(\alpha+1)(n'+r)} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{(\alpha+1)(n+r)} = 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

Extraindo o primeiro termo dos somatórios que iniciavam em -1 e agrupando-os:

$$\begin{aligned} & c_0 r(\alpha+1)[r(\alpha+1)-1]z^{(\alpha+1)(r-1)} + (1-\alpha)[c_0(r(\alpha+1)z^{\alpha+1}(n-1))] + \\ \sum_{n=0}^{\infty} & c_{n+1}\{(n+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1+r)-1] + (1-\alpha)(n+1+r)(\alpha+1)\}z^{(\alpha+1)(n+r)} \\ & + \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^2 c_n z^{(\alpha+1)(n+r)} = 0 \end{aligned} \quad (3.37)$$

E finalmente temos um único somatório:

$$\begin{aligned} & c_0 r(\alpha+1)[r(\alpha+1)-1+1-\alpha]z^{(\alpha+1)(r-1)} + \\ \sum_{n=0}^{\infty} & \{[(n+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1+r)-1] + (1-\alpha)(n+1+r)(\alpha+1)]c_{n+1} \\ & + \lambda^2 c_n\}z^{(\alpha+1)(n+r)} = 0 \end{aligned} \quad (3.38)$$

A equação (3.38) pode ser desmenbrada em duas igualdades:

$$c_0 r(\alpha+1)[r(\alpha+1)-1+1-\alpha] = 0 \quad (3.39)$$

$$[(n+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1+r)-1] + (1-\alpha)(n+1+r)(\alpha+1)]c_{n+1} + \lambda^2 c_n = 0 \quad (3.40)$$

As igualdades (3.39) e (3.40) são chamadas, respectivamente, equação indicial e equação de recorrência.

Da equação indicial calcula-se r:

$$r(\alpha+1)[r(\alpha+1)-1+1-\alpha] = 0 \quad (3.41)$$

De (3.41) com alguns cálculos simples obtém-se que $r = 0$ ou $r = \frac{\alpha}{\alpha+1}$.

Da equação de recorrência segue o cálculo de c_n :

$$[(n+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1+r)-1] + (1-\alpha)(n+1+r)(\alpha+1)]c_{n+1} + \lambda^2 c_n = 0 \quad (3.42)$$

Colocando $(n+1+r)(\alpha+1)$ em evidência:

$$(n+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1+r)-1 + (1-\alpha)]c_{n+1} + \lambda^2 c_n = 0 \quad (3.43)$$

E isolando c_{n+1} :

$$(n+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1+r)-1 + (1-\alpha)]c_{n+1} = -\lambda^2 c_n \quad (3.44)$$

$$c_{n+1} = -\frac{\lambda^2 c_n}{(n+1+r)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1+r)-\alpha]} \quad (3.45)$$

Para $r = 0$ a equação (3.45) torna-se:

$$c_{n+1} = -\frac{\lambda^2 c_n}{(n+1)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n+1)-\alpha]} \quad (3.46)$$

E para $r = \frac{\alpha}{\alpha+1}$:

$$c_{n+1} = -\frac{\lambda^2 c_n}{(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1)(\alpha+1)[(\alpha+1)(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1) - \alpha]} \quad (3.47)$$

$$c_{n+1} = -\frac{\lambda^2 c_n}{[n(\alpha+1) + 2\alpha + 1][n(\alpha+1) + 2\alpha + 1 - \alpha]} \quad (3.48)$$

$$c_{n+1} = -\frac{\lambda^2 c_n}{[n(\alpha+1) + 2\alpha + 1](\alpha+1)(n+1)} \quad (3.49)$$

Retomando o caso onde $r = 0$ e fazendo $n = 0, 1, 2, \dots$ na equação (3.46):

$$n = 0$$

$$c_1 = -\frac{\lambda^2 c_0}{(\alpha+1)} \quad (3.50)$$

$$n = 1$$

$$c_2 = -\frac{\lambda^2 c_1}{2(\alpha+1)[(\alpha+1)(2) - \alpha]}$$

Sustituindo a_1

$$c_2 = -\frac{\lambda^2}{(2\alpha+2)(\alpha+2)} \left(-\frac{\lambda^2 c_0}{(\alpha+1)} \right)$$

$$c_2 = -\frac{\lambda^2}{(2\alpha+2)(\alpha+2)} \left(-\frac{\lambda^2 c_0}{(\alpha+1)} \right)$$

$$c_2 = \frac{\lambda^4 c_0}{2(\alpha+1)^2[2(\alpha+1)-\alpha]} \quad (3.51)$$

$n = 2$

$$c_3 = -\frac{\lambda^2}{3(\alpha+1)[3(\alpha+1)-\alpha]} \left(\frac{\lambda^4 c_0}{2(\alpha+1)^2[2(\alpha+1)-\alpha]} \right)$$

$$c_3 = -\frac{\lambda^6 c_0}{2 \cdot 3(\alpha+1)^3[3(\alpha+1)-\alpha][2(\alpha+1)-\alpha]} \quad (3.52)$$

$n = 3$

$$c_4 = -\frac{\lambda^2}{4(\alpha+1)[4(\alpha+1)-\alpha]} \left(-\frac{\lambda^6 c_0}{2 \cdot 3(\alpha+1)^3[3(\alpha+1)-\alpha][2(\alpha+1)-\alpha]} \right)$$

$$c_4 = \frac{\lambda^8 c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4(\alpha+1)^4[4(\alpha+1)-\alpha][3(\alpha+1)-\alpha][2(\alpha+1)-\alpha]} \quad (3.53)$$

$n = 4$

$$c_5 = -\frac{\lambda^2}{5(\alpha+1)[5(\alpha+1)-\alpha]} \left(-\frac{\lambda^8 c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4(\alpha+1)^4[4(\alpha+1)-\alpha][3(\alpha+1)-\alpha][2(\alpha+1)-\alpha]} \right)$$

$$c_5 = -\frac{\lambda^{10} c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5(\alpha+1)^5[5(\alpha+1)-\alpha][4(\alpha+1)-\alpha][3(\alpha+1)-\alpha][2(\alpha+1)-\alpha]} \quad (3.54)$$

$n = 5$

$$c_6 = -\frac{\lambda^2}{6(\alpha+1)[6(\alpha+1)-\alpha]} \times$$

$$\left(-\frac{\lambda^{10} c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5(\alpha+1)^5[5(\alpha+1)-\alpha][4(\alpha+1)-\alpha][3(\alpha+1)-\alpha][2(\alpha+1)-\alpha]} \right)$$

$$= \frac{\lambda^{12}c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6(\alpha + 1)^6[6(\alpha + 1) - \alpha][5(\alpha + 1) - \alpha][4(\alpha + 1) - \alpha][3(\alpha + 1) - \alpha][2(\alpha + 1) - \alpha]} \quad (3.55)$$

Então:

$$c_1 = -\frac{\lambda^2c_0}{(\alpha + 1)}$$

$$c_2 = \frac{\lambda^4c_0}{2(\alpha + 1)^2[2(\alpha + 1) - \alpha]}$$

$$c_3 = -\frac{\lambda^6c_0}{2 \cdot 3(\alpha + 1)^3[3(\alpha + 1) - \alpha][2(\alpha + 1) - \alpha]}$$

$$c_4 = \frac{\lambda^8c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4(\alpha + 1)^4[4(\alpha + 1) - \alpha][3(\alpha + 1) - \alpha][2(\alpha + 1) - \alpha]}$$

$$c_5 = -\frac{\lambda^{10}c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5(\alpha + 1)^5[5(\alpha + 1) - \alpha][4(\alpha + 1) - \alpha][3(\alpha + 1) - \alpha][2(\alpha + 1) - \alpha]}$$

$$c_6 = -\frac{\lambda^{12}c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6(\alpha + 1)^6[6(\alpha + 1) - \alpha][5(\alpha + 1) - \alpha][4(\alpha + 1) - \alpha][3(\alpha + 1) - \alpha][2(\alpha + 1) - \alpha]}$$

⋮

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha + 1)^n \prod_{i=1}^n [i(\alpha + 1) - \alpha]} \quad (3.56)$$

então a solução é dada por:

$$Z_1(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 z^{(\alpha+1)n}}{n!(\alpha + 1)^n \prod_{i=1}^n [i(\alpha + 1) - \alpha]} \quad (3.57)$$

Segue-se o mesmo procedimento para a solução associada a $r = \frac{\alpha}{\alpha+1}$, variando $n = 0, 1, 2, \dots$ na equação (3.49):

$n = 0$

$$c_1 = -\frac{\lambda^2c_0}{(\alpha + 1)[2\alpha + 1]} \quad (3.58)$$

$n = 1$

$$c_2 = -\frac{\lambda^2}{2(\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1]} \left(-\frac{\lambda^2 c_0}{(\alpha+1)(2\alpha+1)} \right)$$

$$c_2 = \frac{\lambda^4 c_0}{2(\alpha+1)^2(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1]} \quad (3.59)$$

$n = 2$

$$c_3 = -\frac{\lambda^2}{3(\alpha+1)[2(\alpha+1)+2\alpha+1]} \left(\frac{\lambda^4 c_0}{2(\alpha+1)^2(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1]} \right)$$

$$c_3 = -\frac{\lambda^6 c_0}{2 \cdot 3(\alpha+1)^3(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1][2(\alpha+1)+2\alpha+1]} \quad (3.60)$$

$n = 3$

$$c_4 = -\frac{\lambda^2}{4(\alpha+1)[3(\alpha+1)+2\alpha+1]} \times$$

$$\left(-\frac{\lambda^6 c_0}{2 \cdot 3(\alpha+1)^3(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1][2(\alpha+1)+2\alpha+1]} \right)$$

$$c_4 = \frac{\lambda^8 c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4(\alpha+1)^4(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1][2(\alpha+1)+2\alpha+1][3(\alpha+1)+2\alpha+1]} \quad (3.61)$$

$n = 4$

$$c_5 = -\frac{\lambda^2}{5(\alpha+1)[4(\alpha+1)+2\alpha+1]} \times$$

$$\left(\frac{\lambda^8 c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4(\alpha+1)^4(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1][2(\alpha+1)+2\alpha+1][3(\alpha+1)+2\alpha+1]} \right)$$

$$c_5 = -\frac{\lambda^{10} c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5(\alpha+1)^5(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1][2(\alpha+1)+2\alpha+1][3(\alpha+1)+2\alpha+1][4(\alpha+1)+2\alpha+1]} \quad (3.62)$$

$n = 5$

$$c_6 = -\frac{\lambda^2}{6(\alpha+1)[5(\alpha+1)+2\alpha+1]} \times \left(-\frac{\lambda^{10} c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5(\alpha+1)^5(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1][2(\alpha+1)+2\alpha+1][3(\alpha+1)+2\alpha+1][4(\alpha+1)+2\alpha+1]} \right)$$

$$c_6 = -\frac{\lambda^{12}c_0}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6(\alpha+1)^6(2\alpha+1)[(\alpha+1)+2\alpha+1][2(\alpha+1)+2\alpha+1][3(\alpha+1)+2\alpha+1][4(\alpha+1)+2\alpha+1][5(\alpha+1)+2\alpha+1]} \quad (3.63)$$

⋮

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [(i-1)(\alpha+1) + 2\alpha + 1]} \quad (3.64)$$

Substituindo a equação (3.64) em (3.30) obtem-se:

$$Z_2(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 z^{(\alpha+1)(n+\frac{\alpha}{\alpha+1})}}{n!(\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [(i-1)(\alpha+1) + 2\alpha + 1]} \quad (3.65)$$

Agora, retornando a solução associada a $r = 0$:

$$Z_1(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 z^{(\alpha+1)n}}{n!(\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [i(\alpha+1) - \alpha]} \quad (3.66)$$

onde:

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [i(\alpha+1) - \alpha]} = (-1)^n \frac{\lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [(\alpha+1)(i - \frac{\alpha}{\alpha+1})]}$$

$$= (-1)^n \frac{\lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^n (\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [(i + (-\frac{\alpha}{\alpha+1}))]}$$

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^{2n} [1 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})][2 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})][3 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})] \cdots [n + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})]} \quad (3.67)$$

multiplicando e dividindo (3.67) pela função gama $\Gamma[1 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})]$:

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 \Gamma[1 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})]}{n!(\alpha+1)^{2n} [1 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})][2 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})][3 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})] \cdots [n + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})] \Gamma[1 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})]} \quad (3.68)$$

uma importante propriedade da função gama é dada por:

$$x\Gamma(x) = \Gamma(x+1) \quad (3.69)$$

que pode ser obtida pela integração por partes da definição da função gama, logo c_n fica,

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 \Gamma[1 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1})]}{n!(\alpha+1)^{2n} \Gamma[1 + (-\frac{\alpha}{\alpha+1}) + n]} = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 \Gamma[\frac{1}{\alpha+1}]}{n!(\alpha+1)^{2n} \Gamma[n - (\frac{\alpha}{\alpha+1}) + 1]} \quad (3.70)$$

desta forma,

$$\begin{aligned}
Z_1(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 z^{(\alpha+1)n} \Gamma\left[\frac{1}{\alpha+1}\right]}{n! (\alpha+1)^{2n} \Gamma\left[n - \left(\frac{\alpha}{\alpha+1}\right) + 1\right]} \\
Z_1(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{2n} c_0 \Gamma\left[\frac{1}{\alpha+1}\right]}{n! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \\
Z_1(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{2n} c_0 \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{-\frac{\alpha}{\alpha+1}}}{n! \Gamma\left(n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right) \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{-\frac{\alpha}{\alpha+1}}} \Gamma\left[\frac{1}{\alpha+1}\right] \\
Z_1(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}} c_0 \lambda^{\frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{\frac{\alpha}{2}} \left(\frac{1}{\alpha+1}\right)^{\frac{\alpha}{\alpha+1}} \Gamma\left[\frac{1}{\alpha+1}\right]}{n! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \\
Z_1(z) &= \frac{\lambda^{\frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{\frac{\alpha}{2}}}{(\alpha+1)^{\frac{\alpha}{\alpha+1}}} c_0 \Gamma\left[\frac{1}{\alpha+1}\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}}}{n! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \tag{3.71}
\end{aligned}$$

a função obtida em (3.71) é denominada função de Bessel:

$$J_{\mu}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{x}{2}\right)^{2n+\mu}}{n! \Gamma(n + \mu + 1)} \tag{3.72}$$

onde $J_{\mu}(x)$ é a função de Bessel de primeira espécie e ordem μ . Segue então que:

$$Z_1(z) = A z^{\frac{\alpha}{2}} J_{\frac{-\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) \tag{3.73}$$

Agora, retornando ao caso onde $r = \frac{\alpha}{\alpha+1}$:

$$Z_2(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 z^{(\alpha+1)\left(n + \frac{\alpha}{\alpha+1}\right)}}{n! (\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [(i-1)(\alpha+1) + 2\alpha + 1]} \tag{3.74}$$

onde,

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n! (\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [(i-1)(\alpha+1) + 2\alpha + 1]}$$

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n [(\alpha+1)(i-1 + \frac{2\alpha+1}{\alpha+1})]}$$

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^n (\alpha+1)^n \prod_{i=1}^n (i + \frac{\alpha}{\alpha+1})}$$

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0}{n!(\alpha+1)^{2n} (1 + \frac{\alpha}{\alpha+1})(2 + \frac{\alpha}{\alpha+1})(3 + \frac{\alpha}{\alpha+1}) \cdots (n + \frac{\alpha}{\alpha+1})} \quad (3.75)$$

agora multiplicando e dividindo (3.75) por $\Gamma(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1})$

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 \Gamma(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1})}{n!(\alpha+1)^{2n} (1 + \frac{\alpha}{\alpha+1})(2 + \frac{\alpha}{\alpha+1})(3 + \frac{\alpha}{\alpha+1}) \cdots (n + \frac{\alpha}{\alpha+1}) \Gamma(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1})} \quad (3.76)$$

e novamente usando a propriedade (3.69):

$$c_n = \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 \Gamma(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1})}{n!(\alpha+1)^{2n} \Gamma(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1)} \quad (3.77)$$

Então:

$$Z_2(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \lambda^{2n} c_0 \Gamma(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1}) z^{(\alpha+1)(n + \frac{\alpha}{\alpha+1})}}{n!(\alpha+1)^{2n} \Gamma(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1)}$$

$$Z_2(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n c_0 \lambda^{2n} z^{(\alpha+1)n} z^{\alpha} \Gamma(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1})}{n!(\alpha+1)^{2n} \Gamma(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1)}$$

$$Z_2(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n c_0 \left(\frac{\lambda z \frac{\alpha+1}{2}}{\alpha+1}\right)^{2n} \left(\frac{\lambda z \frac{\alpha+1}{2}}{\alpha+1}\right)^{\frac{\alpha}{\alpha+1}}}{n! \Gamma(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1) \left(\frac{\lambda z \frac{\alpha+1}{2}}{\alpha+1}\right)^{\frac{\alpha}{\alpha+1}}} z^{\alpha} \Gamma\left(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1}\right)$$

$$Z_2(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n c_0 \left(\frac{\lambda z \frac{\alpha+1}{2}}{(\alpha+1)}\right)^{2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}}}{n! \Gamma(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1)} \lambda^{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{-\frac{\alpha}{2}} (\alpha+1)^{\frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{\alpha} \Gamma\left(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1}\right)$$

$$Z_2(z) = c_0 \left(\frac{\alpha+1}{\lambda}\right)^{\frac{\alpha}{\alpha+1}} \Gamma\left(1 + \frac{\alpha}{\alpha+1}\right) z^{\frac{\alpha}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \left(\frac{\lambda z \frac{\alpha+1}{2}}{(\alpha+1)}\right)^{2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}}}{n! \Gamma(n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1)}$$

Assim,

$$Z_2(z) = Bz^{\frac{\alpha}{2}} J_{\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) \quad (3.78)$$

Dessa forma tem-se a seguinte solução:

$$Z(z) = Z_1(z) + Z_2(z) \quad (3.79)$$

$$Z(z) = Az^{\frac{\alpha}{2}} J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) + Bz^{\frac{\alpha}{2}} J_{\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) \quad (3.80)$$

Agora vamos verificar se a equação (3.80) satisfaz às condições de fronteira (3.14) e (3.15). Para isso vamos calcular separadamente as derivadas de Z_1 e Z_2 dadas por (3.73) e (3.78) respectivamente.

Cálculo de $Z_2'(z)$

Note que:

$$Z_2(z) = Bz^{\frac{\alpha}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma \left[n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1 \right]} \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right)^{2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}} \quad (3.81)$$

$$Z_2(z) = B \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma \left[n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1 \right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1} \right)^{2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{\frac{\alpha+1}{2} (2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}) + \frac{\alpha}{2}} \quad (3.82)$$

$$Z_2(z) = B \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma \left[n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1 \right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1} \right)^{2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{n(\alpha+1) + \alpha} \quad (3.83)$$

Das propriedades de somatório tem-se a comutatividade da derivada:

$$D \sum f(x) = \sum Df(x) \quad (3.84)$$

Segue que

$$Z_2'(z) = B \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n [(\alpha+1)n + \alpha]}{n! \Gamma \left[n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1 \right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1} \right)^{2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{(\alpha+1)n + \alpha - 1} \quad (3.85)$$

Mas esta solução não satisfaz a condição de fronteira $Z'(0) = 0$, porque

$$Z_2'(z) = \frac{B\alpha}{\Gamma\left[\frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1}\right)^{\frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{\alpha-1} + B \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n [(\alpha+1)n + \alpha]}{n! \Gamma\left[n + \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1}\right)^{2n + \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{(\alpha+1)n + \alpha - 1} \quad (3.86)$$

o segundo termo tende a zero quando z tende a zero mas o primeiro termo tende para infinito quando z tende a zero. Portanto podemos desprezar o termo Z_2 na expressão (3.80).

Cálculo de $Z_1'(z)$

Note que:

$$Z_1(z) = Az^{\frac{\alpha}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}} \quad (3.87)$$

$$Z_1(z) = A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1}\right)^{2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{\frac{\alpha+1}{2}(2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}) + \frac{\alpha}{2}} \quad (3.88)$$

$$Z_1(z) = A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1}\right)^{2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{(\alpha+1)n} \quad (3.89)$$

Logo,

$$Z_1'(z) = A \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\alpha+1)n}{n! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1}\right)^{2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{(\alpha+1)n-1} \quad (3.90)$$

$$Z_1'(z) = A \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\alpha+1)}{(n-1)! \Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1}\right)^{2n - \frac{\alpha}{\alpha+1}} z^{(\alpha+1)n-1} \quad (3.91)$$

e a condição de fronteira $Z'(0) = 0$ é satisfeita para esta solução.

Assim sendo, a solução da equação (3.23), que satisfaz a condição de fronteira $Z'(0) = 0$ é dada por,

$$Z(z) = Az^{\frac{\alpha}{2}} J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right) \quad (3.92)$$

Agora, aplicando a condição de fronteira $Z'(h) = 0$ tem-se

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}(\alpha+1)}{(n)!\Gamma\left[n - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 2\right]} \left(\frac{\lambda}{\alpha+1}\right)^{2n+2-\frac{\alpha}{\alpha+1}} h^{(\alpha+1)n+\alpha} = 0 \quad (3.93)$$

$$\left(-\lambda h^{\frac{3\alpha}{2}}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n)!\Gamma\left[n+1 - \frac{\alpha}{\alpha+1} + 1\right]} \left(\frac{\lambda h^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right)^{2n+1-\frac{\alpha}{\alpha+1}} = 0 \quad (3.94)$$

Consequentemente, $\lambda = \lambda_n$ é solução da equação:

$$J_{1-\frac{\alpha}{\alpha+1}}\left(\frac{2\lambda h^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right) = 0 \quad (3.95)$$

e finalmente substituindo-se (3.29) e (3.92) em (3.16) obtemos a seguinte expressão para a distribuição de concentração,

$$\bar{c}^y(x, z) = a_n J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}}\left(\frac{2\lambda_n z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1}\right) e^{-\frac{\lambda_n^2 \rho x^\alpha}{\alpha}} \quad (3.96)$$

Porém esta solução se anula para $n = 0$, pois λ_0 é zero e $J(0) = 0$. Neste caso é necessário aplicar as condições de fronteira (3.14) na solução da equação (3.23) quando $\lambda_0 = 0$.

Para $\lambda_0 = 0$ em (3.23)

$$Z''(z) + (1 - \alpha)z^{-1}Z(z) = 0 \quad (3.97)$$

$$Z(z) = \frac{C_1 z^\alpha}{\alpha} + C_2 \quad (3.98)$$

$$Z'(z) = C_1 z^{\alpha-1} \quad (3.99)$$

Para $z = 0$ em (3.99) obtem-se:

$$Z'(0) = 0 \quad (3.100)$$

entretanto para $z = h$ em (3.99), tem-se:

$$Z'(h) \neq 0 \quad (3.101)$$

Para que (3.98) satisfaça as condições de fronteira (3.14) é necessário que $C_1 = 0$. Neste caso (3.98) torna-se,

$$Z(z) = C_2 \quad (3.102)$$

Para $\lambda_0 = 0$ em (3.29):

$$X(x) = c \quad (3.103)$$

Logo para $\lambda = 0$ temos $C(x, z) = cte$

Portanto a equação (3.96) torna-se

$$\bar{c}^y(x, z) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_n z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) e^{-\frac{\lambda_n^2 \rho x^\alpha}{\alpha}} \quad (3.104)$$

Para calcular a_n vamos considerar a condição inicial (3.15):

$$\bar{c}^y(0, z) = \frac{Q}{u} \delta(z - H_s) \quad (3.105)$$

$$a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_n z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) = \frac{Q}{u} \delta(z - H_s) \quad (3.106)$$

Multiplicando a equação 3.106 por

$$J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_l z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) \quad (3.107)$$

e integrando de zero a $z = h$, obtem-se:

$$\int_0^h \left(a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_n z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) \right) J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_l z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) dz$$

$$= \int_0^h \frac{Q}{u} J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_l z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) \delta(z - H_s) dz \quad (3.108)$$

$$\begin{aligned} a_0 \int_0^h J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_l z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) dz + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_0^h J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_n z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_l z^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) dz \\ = \frac{Q}{u} J_{-\frac{\alpha}{\alpha+1}} \left(\frac{2\lambda_l H_s^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\alpha+1} \right) \end{aligned} \quad (3.109)$$

O sistema é resolvido numericamente.

O modelo de dispersão de contaminantes na CLP desenvolvido neste trabalho, empregando as derivadas de Hausdorff, é descrito pela equação (3.104), com λ dado por (3.95) e a_n dado por (3.109) .

4 EXPERIMENTOS E ÍNDICES ESTATÍSTICOS

Neste capítulo apresenta-se uma descrição dos experimentos utilizados para a validação do modelo proposto e dos índices estatísticos a serem usados na comparação entre os dados de concentração simulados no modelo e os dados observados nos experimentos. O processo de validação do modelo é uma atitude de investigação científica, no qual busca-se a compreensão e verbalização das soluções obtidas. Encontrar o resultado do problema, questionar o resultado obtido, comparar com o resultado original fazem parte do processo e são fundamentais. Cada problema deve ter um objetivo específico e uma característica peculiar, para que possa ser um desafio e não apenas um exercício habitual. Um modelo operacional para o cálculo da concentração de contaminantes que é utilizado para prevenção da qualidade do ar deve ter os seguintes atributos:

- Descrever realisticamente os processos físicos que governam o sistema a ser modelado.
- Produzir estimativas adequadas de dados observacionais.

Hanna criou uma divisão em três etapas com o objetivo de organizar um pouco o processo de validação [9]:

- Examinar a estrutura do modelo
- Analisar a sensibilidade,
- Testar o modelo com os dados observados

Outro passo importante é examinar as hipóteses envolvidas na formulação do modelo e compreender o que é necessário para sua validação, dessa forma é possível organizar e consolidar o modelo, determinando uma discriminação entre os diferentes modelos.

4.1 Índices Estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados nos experimentos é usualmente feita através dos índices estatísticos presentes na literatura, onde c_p é a concentração obtida, c_o é a concentração observada, σ_p é o desvio padrão obtido, σ_o é o desvio padrão observado [9]. Os índices estatísticos aplicados são definidos da seguinte forma :

- *Erro quadrático médio normalizado*: estimativa de quanto os dados observados e preditos diferem uns dos outros. A normalização indica que o erro não depende da grandeza dos dados.

$$\text{NMSE} = \frac{\overline{(c_o - c_p)^2}}{\overline{c_o c_p}}$$

- *Coefficiente de correlação*: apresenta o grau de relação entre os dados e assume um valor compreendido entre -1 e 1. Se os dados estão correlacionados, ou seja, variam do mesmo modo, então $Cor > 0$, se os dados não estão correlacionados, ou seja, são inversamente relacionados, então $Cor < 0$.

$$Cor = \frac{(\overline{c_o - \bar{c}_p})(\overline{c_p - \bar{c}_p})}{\sigma_o \sigma_p}$$

- *Fator de dois*: Indica o percentual, normalizado, dos dados calculados entre um fator de dois daqueles observados, isto é, a fração de dados que estão entre $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$.
- *Fractional Bias*: informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. Valores de $FB > 0$ indicam que o modelo está subestimando os dados experimentais, enquanto valores de $FB < 0$ indicam que o modelo está superestimando os dados experimentais.

$$FB = \frac{\overline{c_o - \bar{c}_p}}{0.5(\bar{c}_o + \bar{c}_p)}$$

- *Desvio fracional padrão*:

$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0.5(\sigma_o + \sigma_p)}$$

Os resultados que tornam o modelo mais confiável são dados para os valores 0 em NMSE, FS e FB, e 1 para Cor e FA2.

4.2 Dados Experimentais

Para avaliar a performance do modelo neste trabalho foram utilizados os dados observados em três experimentos: Experimento de Prairie Grass, Experimento de Copenhagen e Experimento de Hanford.

A razão entre a altura onde ocorre a emissão de contaminantes (H_s) e a altura da CLC (z_i) determina se o experimento é considerado de fonte alta ou baixa, isto é:

se $\frac{H_s}{z_i} < 0,1$ o experimento é considerado de fonte baixa;

se $\frac{H_s}{z_i} > 0,1$ o experimento é considerado de fonte alta.

A razão entre a altura da CLP (h) e do comprimento da Monin-Obukov (L) determina se o experimento é de convecção fraca, moderada ou alta, ou seja:

se $\frac{z_i}{|L|} < 5$ a convecção é fraca;

se $5 < \frac{z_i}{|L|} < 10$ a convecção é moderada;

se $\frac{z_i}{|L|} > 10$ a convecção é alta.

4.3 O Experimento de Copenhagen

O experimento de Copenhagen descrito no artigo [33] foi realizado entre setembro de 1978 e julho de 1979, na região norte da cidade de Copenhagen na Dinamarca, e é considerado um dos mais importantes no estudo de dispersão de contaminantes. Neste experimento o traçador hexafluoreto de enxofre (SF_6) foi liberado sem empuxo a partir de uma fonte de emissão, isto é, de um cilindro posicionado perpendicularmente ao solo simulando uma chaminé, de 115m de altura, com uma taxa de emissão de 100 g/s e coletado ao nível do solo, por unidades de amostragem distribuídas em três arcos perpendiculares a direção do vento médio. Os arcos foram posicionados a distâncias de 2 a 6 km, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do SF_6 , conforme ilustra a Fig. 4.1. As concentrações foram observadas ao nível do solo, a média das medidas foi de 1h e sua imprecisão experimental é de aproximadamente 10%, a região era principalmente residencial com o comprimento de rugosidade de 0,6 m.

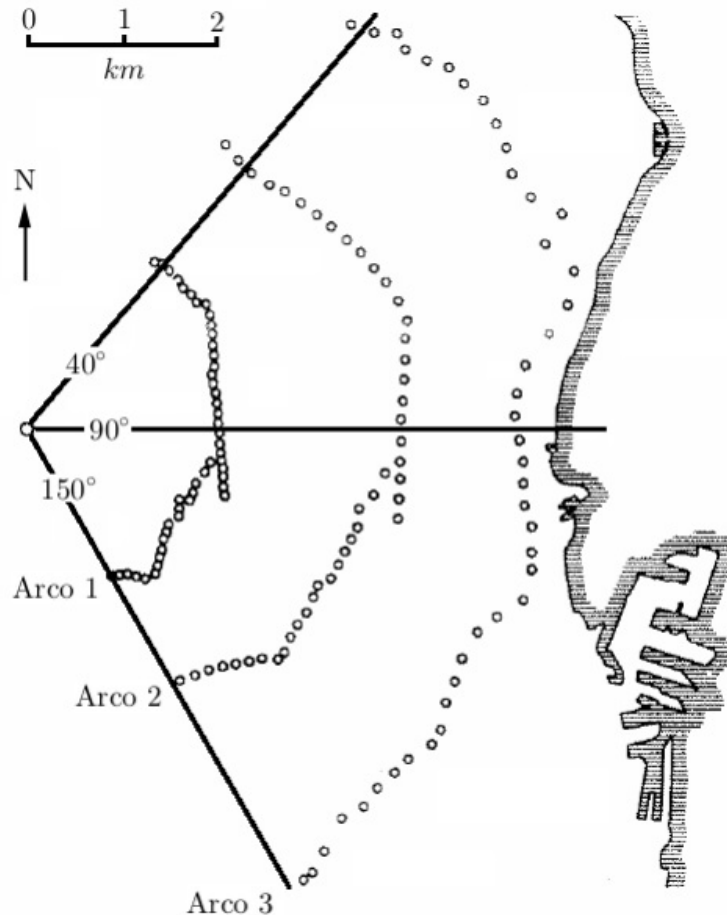


Figura 4.1: Ilustração do experimento de Copenhagen. Fonte: adaptado de [33]

A tabela 1 apresenta os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão de Copenhagen utilizados como parâmetros de entrada no modelo. Onde σ_w é o desvio padrão vertical da componente turbulenta da velocidade do vento, u_* é a velocidade de fricção ou atrito, L é o

Tabela 1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen

Exp.	\bar{u}_{10} (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L(m) (m)	σ_w (ms^{-1})	h (m)
1	2.1	0.37	-46	0.83	1980
2	4.9	0.74	-384	1.07	1920
3	2.4	0.39	-108	0.68	1120
4	2.5	0.39	-173	0.47	390
5	3.1	0.46	-577	0.71	820
6	7.2	1.07	-569	1.33	1300
7	4.1	0.65	-136	0.87	1850
8	4.2	0.70	-72	0.72	810
9	5.1	0.77	-382	0.98	2090

comprimento de Monin-Obukhov e h é a altura da CLP.

Tabela 2: Concentrações observadas lateralmente ($c^y(x, 0)/Q$) ($10^{-4}sm^{-2}$) do experimento de Copenhagen. Fonte: [33]

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

A Tabela 2 apresenta as concentrações observadas lateralmente para diferentes distâncias da fonte.

4.4 O Experimento de Prairie Grass

O experimento de dispersão de Prairie Grass foi realizado em O'Neill, Nebraska, USA, em Julho e Agosto de 1956, descrito por [34]. Durante o experimento o gás traçador (dióxido de enxofre, SO_2) foi liberado continuamente durante 10 minutos a partir de uma fonte pontual F, ver figura (4.2), próxima a superfície (0,5 m), em um terreno plano com comprimento de rugosidade aerodinâmica de apenas $6 \cdot 10^{-3}$ m, e coletado na altura de 1,5 m, em cerca de 540 pontos distribuídos sobre os arcos ilustrados na Fig. 4.2, nas seguintes distâncias da fonte: 50, 100, 200, 400 e 800 m, ao todo foram 70 experimentos sob ampla variação de condições meteorológicas.

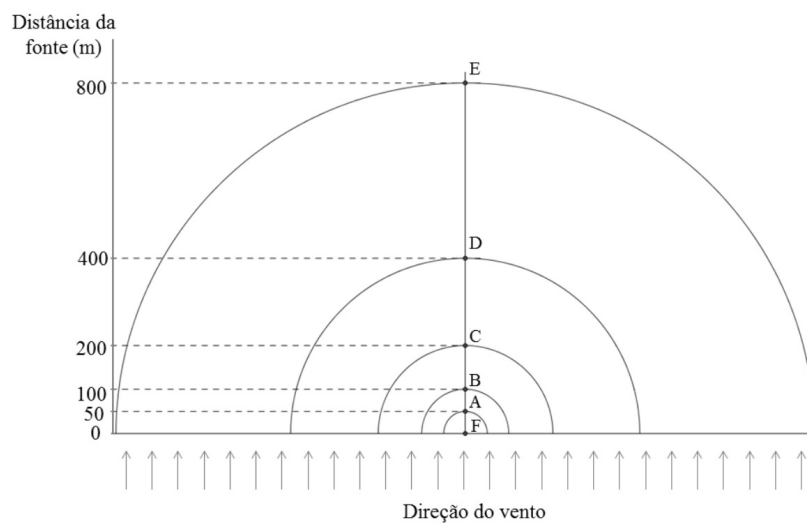


Figura 4.2: Ilustração do experimento de Prairie Grass (vista superior).

Tabela 3: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Prairie Grass (Casos Estáveis).
 Fonte: [35]

Exp.	Data	Horário	L (m)	h (m)	u_* ms^{-1}	w_* ms^{-1}	Q gs^{-1}	U_{10m} (m)
17	23/07/1956	20:00	61,54	148	0,2207	-0,44	56,5	2,87
18	23/07/1956	22:00	30,56	100	0,2027	-0,51	57,6	2,68
21	25/07/1956	22:00	216,92	379	0,4132	-0,55	50,9	5,31
22	26/07/1956	00:00	241,02	438	0,4975	-0,63	48,4	6,39
23	29/07/1956	21:00	245,56	405	0,4181	-0,53	40,9	5,37
24	29/07/1956	23:00	327,37	461	0,4061	-0,47	41,2	5,21
28	03/08/1956	00:00	20,50	100	0,1578	-0,46	41,7	2,12
29	03/08/1956	02:00	35,86	122	0,2584	-0,62	41,5	3,40
32	06/08/1956	20:00	6,32	100	0,1076	-0,46	41,4	1,60
35S	07/08/1956	23:00	72,88	175	0,2621	-0,50	41,8	3,40
35	11/08/1956	22:00	3,63	100	0,0670	-0,35	38,8	1,10
36	11/08/1956	23:00	7,53	100	0,0942	-0,38	40,0	1,37
37	12/08/1956	03:00	115,92	240	0,3100	-0,50	40,3	4,00
38	12/08/1956	05:00	117,02	232	0,2868	-0,47	45,4	3,70
39	13/08/1956	22:00	8,06	100	0,1172	-0,46	40,7	1,69
40	14/08/1956	01:00	7,49	100	0,1086	-0,44	40,5	1,58
41	14/08/1956	03:00	38,48	122	0,2406	-0,57	39,9	3,16
42	14/08/1956	05:00	162,73	326	0,4094	-0,60	56,4	5,27
46	15/08/1956	19:00	155,16	306	0,3775	-0,56	99,7	4,86
53	24/08/1956	20:00	4,04	100	0,0972	-0,48	45,2	1,56
54	24/08/1956	22:00	48,27	142	0,2603	-0,57	43,4	3,40
55	25/08/1956	01:00	140,84	301	0,4013	-0,61	45,3	5,17
56	25/08/1956	02:00	104,64	232	0,3213	-0,54	45,9	4,15
58	25/08/1956	19:00	6,90	100	0,1123	-0,47	40,5	1,65
59	25/08/1956	22:00	12,59	100	0,1460	-0,50	40,2	2,02
60	26/08/1956	01:00	75,19	194	0,3116	-0,59	38,5	4,04
65	29/08/1956	20:00	51,46	157	0,3012	-0,64	44,1	3,93
66	29/08/1956	22:00	18,22	100	0,1894	-0,57	43,1	2,56
67	30/08/1956	01:00	104,62	223	0,2981	-0,50	45,0	3,85
68	30/08/1956	03:00	23,52	100	0,1640	-0,45	42,8	2,19

4.5 O Experimento de Hanford

O experimento de Hanford foi realizado em uma região semi-árida de sul a leste do estado de Washington, EUA, no ano de 1983, sob condições atmosféricas estáveis e quase neutras, descrito em [36]. Trata-se de um experimento de fonte baixa. Os traçadores hexafluoreto de enxofre (SF_6) e (ZnS) foram lançados, simultaneamente, sem empuxo de uma altura de 2m a uma taxa média de liberação de $0,3 \text{ gs}^{-1}$. Ao todo foram conduzidos 6 experimentos, com tempo médio de liberação em torno de 30 minutos, exceto no experimento 5 que foi de 22 minutos. As concentrações foram medidas por unidades de amostragem localizadas em círculos concêntricos com raios de 100, 200, 800, 1600 e 3200 m. O terreno é plano com comprimento de rugosidade $z_o = 0,03 \text{ m}$.

A Tabela 5 apresenta os dados meteorológicos do experimento de dispersão de Hanford que foram utilizados como parâmetros de entrada no modelo.

Tabela 4: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford. Fonte: [35]

Exp.	Data	L (m)	h (m)	u_* ms^{-1}	Q gs^{-1}	U_{2m} (m)
1	18/05/1983	166	325	0,40	0,3	3,63
2	26/05/1983	44	135	0,26	0,3	1,42
3	05/06/1983	77	182	0,27	0,3	2,02
4	12/06/1983	34	104	0,20	0,3	1,50
5	24/06/1983	59	157	0,26	0,3	1,41
6	27/06/1983	71	185	0,30	0,3	1,54

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A análise da performance do modelo de dispersão empregando a derivada de Hausdorff, proposto neste trabalho, é feita através da comparação dos resultados obtidos a partir da equação (3.104) com o modelo Gaussiano classico, com o modelo Gaussiano operacional e com o modelo proposto por [37], onde foi empregado a derivada fracionária de Caputo na parametrização do fluxo de concentração e no termo advectivo. A velocidade média do vento é obtida diretamente dos dados experimentais. Para obter a constante do coeficiente de difusividade K_z , segue-se o procedimento introduzido em [32], onde foi considerado a media espacial $K_z = \langle K \rangle$ do coeficiente de difusividade que é uma função linear da distância a favor do vento expressada por $K = \rho u x$, onde ρ é o parâmetro da turbulência. O parâmetro de turbulência ρ é parametrizado como o quadrado da intensidade turbulenta usando a teoria estatística de Taylor $\rho = (\frac{\sigma_w}{u})^2$ [38], onde σ_w é o desvio padrão vertical da componente turbulenta da velocidade do vento. Para os casos estáveis foi usada a relação proposta por Hanna [?] ($\sigma_w = 1.3u_*(1 - z/h)$). Os dados experimentais do experimento de Copenhagem [8], do experimento de Prairie Grass [34] e do experimento de Hanford [39] foram separados em dois grupos: um com $\frac{h}{|L|} < 10$ e outro com $\frac{h}{|L|} > 10$, onde L é o comprimento de Monin-Obukhov [40] e h é a altura da CLP. O parâmetro $\frac{h}{|L|}$ é obtido a partir da equação do balanço de energia em um fluxo turbulento. Este parâmetro pode ser usado para avaliar algumas características da estrutura física do fluxo turbulento. Para $\frac{h}{|L|} < 10$ tem-se a predominância da entrada de energia mecânica (cisalhamento de vento) em um fluxo turbulento. Para $\frac{h}{|L|} > 10$ tem-se a predominância da entrada de energia de convecção térmica em um fluxo turbulento. A análise destas duas situações visa mostrar o valor de α (ordem da equação fracionária) que melhor descreve a distribuição da concentração.

5.1 Resultados para $\frac{h}{|L|} < 10$

Para estimar o melhor valor de α para cada experimento, analisou-se a solução do modelo proposto neste trabalho variando α de 0.50 a 0.99 em passos de 0.01. Percebeu-se que, independentemente do experimento, para $\frac{h}{|L|} < 10$ o modelo fracionário de Hausdorff com velocidade e coeficiente de difusão constantes (Eq. 3.104) descreve relativamente bem todos os experimentos com $\alpha = 0.54$.

5.1.1 Experimento de Copenhagem

Para o experimento de Copenhagem, a tabela 6 mostra que, quando compara-se aos modelos Gaussiano e Gaussiano Operacional (G-O), usando uma velocidade média do vento constante e difusividade turbulenta também constante, o modelo proposto neste trabalho apresenta um bom resultado para a distribuição da concentração de contaminantes na CLP gerada por um fluxo turbulento onde a fonte de convecção térmica e entrada mecânica é bastante relevante. Também mostra um resultado similar ao obtido por Goulart em [37], principalmente quando se

Tabela 5: Experimento de Copenhagen para $\frac{h}{|L|} < 10$ (instável)

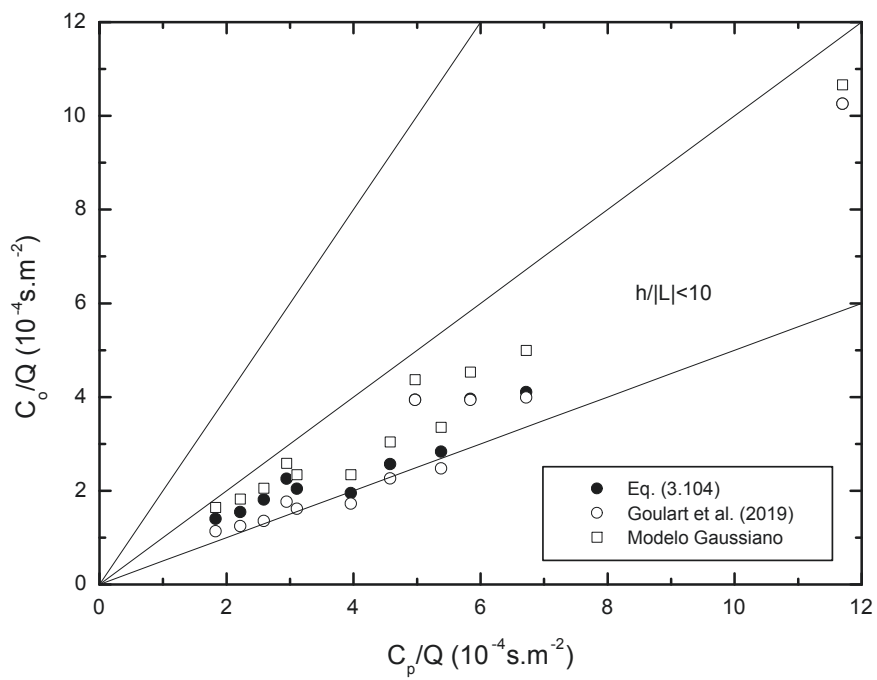
Modelo	Cor	NMSE	FS	FB	FA2
Eq. 3.104	0.96	0.12	0.10	-0.36	1.00
Goulart et al. (2019)	0.97	0.05	0.08	-0.24	1.00
Modelo Gaussiano	0.96	0.17	0.06	-0.44	0.75
Modelo G-O	0.97	0.83	1.00	-0.77	0.41
Moreira (2005)	0.97	0.02	0.05	0.01	1.00
Kumar (2012)	0.90	0.05	0.34	-0.04	0.96

compara os resultados para a correlação e fator de dois. No modelo de Goulart [37] é empregado a derivada fracionária de Caputo para parametrizar o fluxo de concentração.

Apresenta também bons resultados quando compara-se a alguns modelos de dispersão Eulerianos encontrados na literatura, os quais empregam derivadas de ordem inteira na equação de difusão-advecção. No caso do modelo de Moreira [41], a equação de difusão-advecção estacionária emprega uma velocidade do vento que é uma função da altura z , e uma difusividade turbulenta que é uma função da altura z e da distância horizontal x . A equação diferencial é resolvida pelo método GILTT [42], estendido para o caso em que a difusividade turbulenta é uma função de z e x . No caso do modelo de Kumar [43] o método GILTT é usado para resolver a equação de difusão-advecção, mas neste caso a velocidade do vento e o coeficiente de difusão são funções somente da altura z . A tabela 6 mostra que o modelo fracionário proposto neste trabalho empregando a derivada de Hausdorff, com a velocidade do vento e o coeficiente de difusão constantes, tem performance similar ao modelo de Moreira [41]. É possível ver também que o modelo fracionário proposto neste trabalho teve melhor performance que o modelo de Kumar [43]. Observa-se também que a velocidade do vento e o coeficiente de difusão que descreve mais corretamente o fluxo turbulento, usado em Moreira [41] e Kumar [43], tende a compensar a deficiência da estrutura matemática da equação de difusão-advecção clássica que descreve a distribuição de concentração [37].

Nesse trabalho, a velocidade do vento e o coeficiente de difusão constantes foram usados precisamente para mostrar a capacidade da equação de difusão-advecção fracionária para descrever com maior precisão a distribuição de concentração de contaminantes. Além dos índices estatísticos, a figura (5.1) mostra o diagrama de dispersão da concentração observada e da concentração prevista. As linhas indicam o fator de dois.

Figura 5.1: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Copenhagen (instável).



5.1.2 Experimento de Prairie Grass

Na tabela 7 mostra-se os resultados obtidos para o experimento de Prairie Grass estável com $\frac{h}{|L|} < 4$. Neste caso, o regime de estabilidade pode ser considerado mais próximo do neutro. Observou-se que o modelo fracionário teve uma performance melhor que os modelos Gaussiano e Modelo G-O em todas as distâncias. Além disso, viu-se que para as distâncias maiores a diferença entre o modelo fracionário e o modelo Gaussiano fica mais evidente. As figuras (5.2), (5.3), (5.4) e (5.5) mostram o diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para as distâncias de 200m a 800m. Observou-se que a performance do modelo fracionário é superior a performance do modelo Gaussiano em ambas distâncias. Atribui-se a melhor performance do modelo fracionário em relação ao modelo Gaussiano pelo fato de que a distribuição da concentração em um fluxo turbulento não obedece a uma distribuição de probabilidade Gaussiana, mas sim uma distribuição de difusão anômala, induzida pela turbulência, com uma lei de potência fracionária para o deslocamento quadrático médio [5, 32, 37].

Tabela 6: Experimento de Prairie Grass para $\frac{h}{|L|} < 4$ (estável)

Distancia (m)	Modelo	Cor	NMSE	FS	FB	Fa2
200	Eq. 3.104	0.96	1.43	1.21	-0.99	0.00
	Goulart et al. (2019)	0.96	1.68	1.06	-1.08	0.00
	Modelo Gaussiano	0.96	3.23	1.47	-1.31	0.00
	Modelo O-G	0.96	0.95	1.08	-0.83	0.06
800	Eq. 3.104	0.90	0.26	0.87	-0.36	0.94
	Goulart et al. (2019)	0.90	0.47	0.89	-0.56	0.88
	Modelo Gaussiano	0.89	1.56	1.33	-0.97	0.17
	Modelo O-G	0.84	1.72	1.35	-1.02	0.06
≥ 200	Eq. 3.104	0.94	1.09	1.24	-0.78	0.53
	Goulart et al. (2019)	0.91	1.35	1.20	-0.89	0.41
	Modelo Gaussiano	0.97	2.82	1.46	-1.20	0.06
	Modelo O-G	0.97	2.82	1.46	-1.20	0.06
≥ 400	Eq. 3.104	0.94	0.55	1.05	-0.56	0.79
	Goulart et al. (2019)	0.93	0.73	1.03	-0.68	0.41
	Modelo Gaussiano	0.94	2.06	1.40	-1.08	0.08
	Modelo O-G	0.95	2.06	1.40	-1.08	0.08
Todas as distâncias	Eq. 3.104	0.96	2.91	1.48	-1.15	0.31
	Goulart et al. (2019)	0.85	3.72	1.47	-1.27	0.31
	Modelo Gaussiano	0.98	4.56	1.54	-1.39	0.02
	Modelo O-G	0.98	4.56	1.54	-1.39	0.02

Figura 5.2: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (a) $x = 200m$.

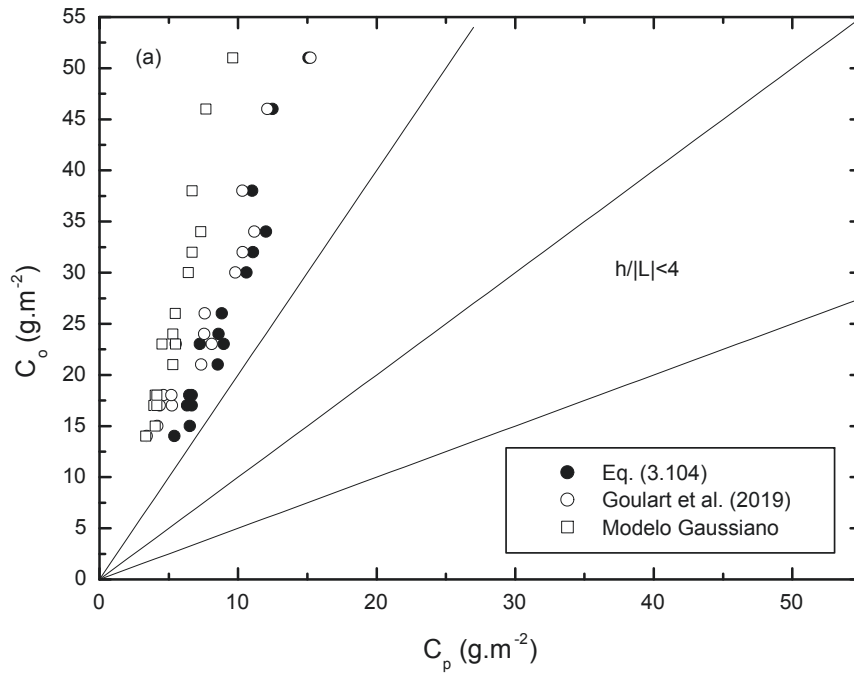


Figura 5.3: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (b) $x = 800m$.

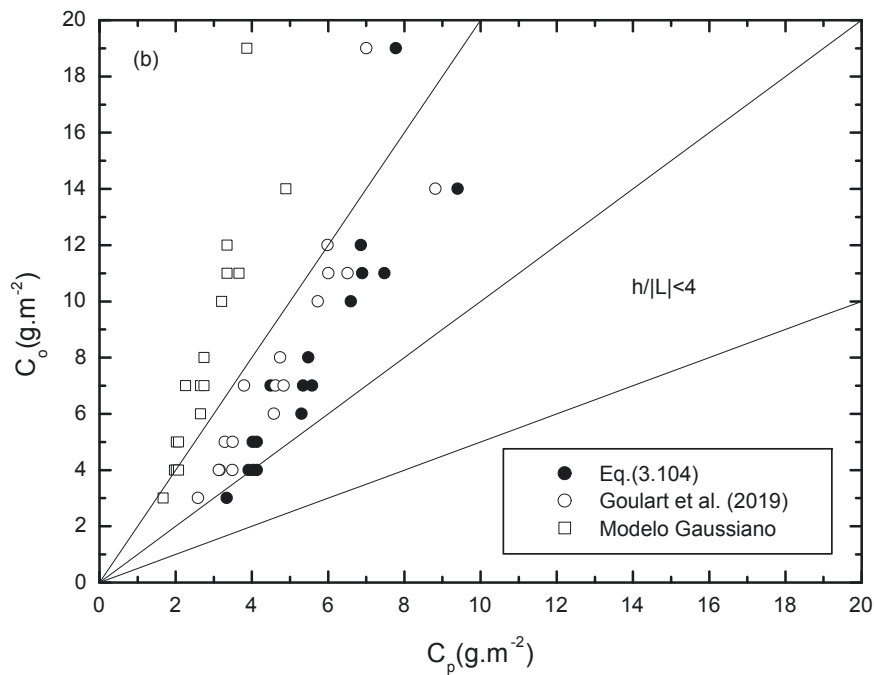


Figura 5.4: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (c) $x \geq 200m$.

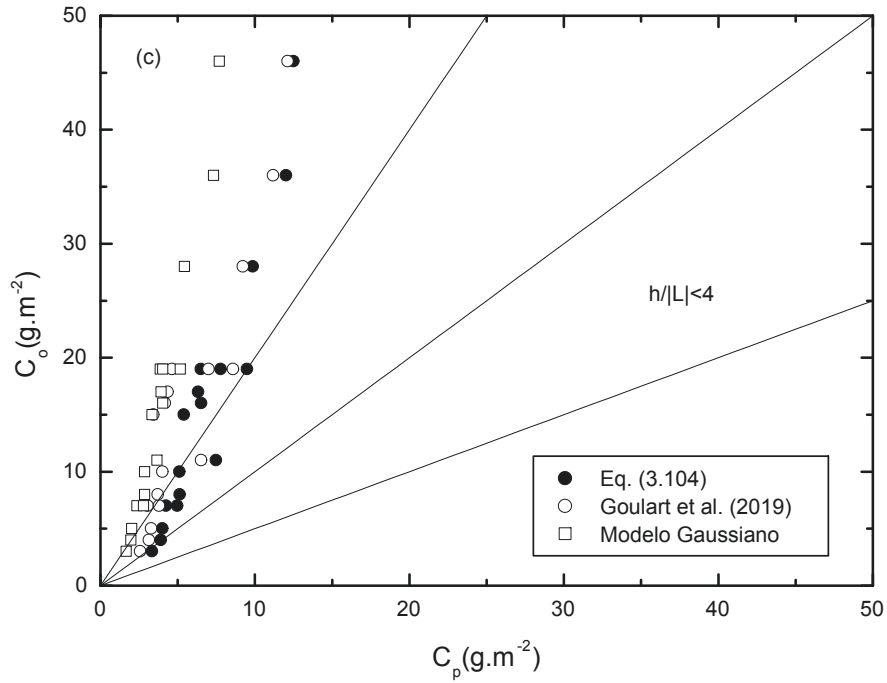
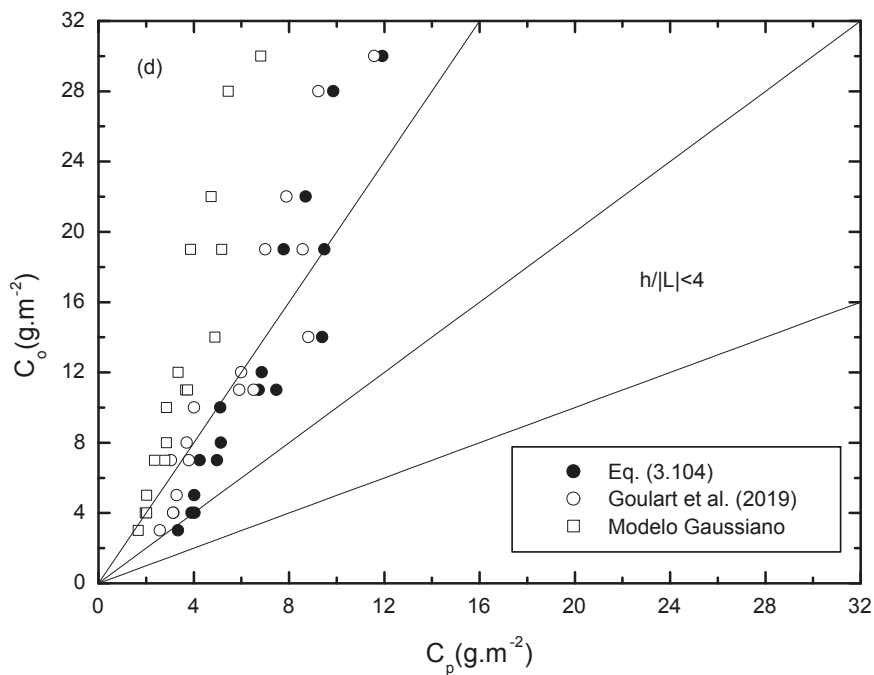


Figura 5.5: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento da Prairie Grass (estável). (d) $x \geq 400m$.



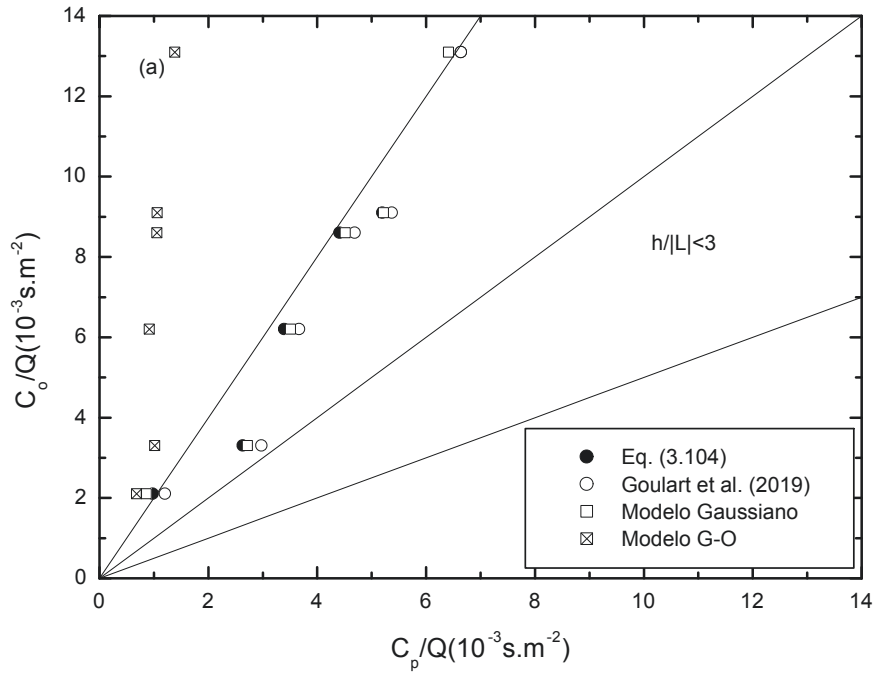
5.1.3 Experimento de Hanford

Tabela 7: Experimento de Hanford para $\frac{h}{|L|} \leq 3$ (estável)

Distancia (m)	Modelo	Cor	NMSE	FS	FB	Fa2
100	Eq. 3.104	0.63	10.91	1.81	-1.73	0.00
	Goulart et al (2019)	0.65	10.32	1.80	-1.66	0.00
	Modelo Gaussiano	0.63	13.21	1.84	-1.71	0.00
	Modelo G-O	0.62	15.33	1.88	-1.74	0.00
1600	Eq. 3.104	0.98	0.41	0.68	-0.58	0.83
	Goulart et al (2019)	0.97	0.36	0.72	-0.53	1.00
	Modelo Gaussiano	0.97	0.42	0.69	-0.58	0.66
	Modelo G-O	0.88	6.21	1.78	-1.49	0.00
3200	Eq. 3.104	0.96	0.11	0.46	-0.23	1.00
	Goulart et al (2019)	0.95	0.10	0.50	-0.19	1.00
	Modelo Gaussiano	0.95	0.12	0.49	-0.22	1.00
	Modelo G-O	0.84	6.54	1.81	-1.48	0.00
≤ 800	Eq. 3.104	0.44	10.65	1.78	-1.59	0.00
	Goulart et al (2019)	0.60	8.27	1.77	-1.51	0.05
	Modelo Gaussiano	0.48	10.32	1.79	-1.58	0.00
	Modelo G-O	0.82	14.24	1.83	-1.71	0.00
≥ 1600	Eq. 3.104	0.92	0.28	0.63	-0.42	0.92
	Goulart et al (2019)	0.92	0.26	0.67	-0.38	1.00
	Modelo Gaussiano	0.90	0.29	0.65	-0.42	0.83
	Modelo G-O	0.83	6.31	1.75	-1.49	0.00
Todas as distâncias	Eq. 3.104	0.35	7.58	1.75	-1.42	0.37
	Goulart et al (2019)	0.55	7.57	1.74	-1.35	0.43
	Modelo Gaussiano	0.39	9.31	1.76	-1.42	0.33
	Modelo G-O	0.87	14.01	1.80	-1.68	0.00

A tabela 8 mostra os resultados dos modelos fracionários, Gaussiano e G-O para o experimento de Hanford com $\frac{h}{|L|} < 3$. No experimento de Hanford, tem-se um regime estável, com uma velocidade do vento muito baixa ($\approx 1.5ms^{-1}$). Assim sendo, o fluxo é ligeiramente turbulento e as características de difusão anômala, presentes em um fluxo fortemente turbulento, não são muito evidentes. Neste caso, espera-se que a distribuição de probabilidade gaussiana possa ser empregada para modelar o problema. As figuras (5.6), (5.7) e (5.8) mostram o diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Hanford. Vê-se que modelo proposto neste trabalho (Eq. 3.104), o modelo fracionário [37] e os modelos Gaussianos tem performance muito similar. Contudo, o modelo G-O falha totalmente neste caso, isso está relacionado à aproximação feita para que a solução satisfaça as condições de contorno. Os valores das distâncias nas direções x e z envolvidas nos experimentos de Copenhagen e Prairie Grass são semelhantes em quase todos os experimentos. Neste caso, a aproximação dos contornos tendendo para infinito (feita no modelo G-O) tem um bom resultado. Em particular, para Prairie Grass estável onde as distâncias x e z são $\approx 800m$ e $400m$, respectivamente, a diferença entre o modelo Gaussiano e o modelo G-O é insignificante. No experimento de Hanford, os valores das

Figura 5.6: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Hanford. (a) $x = 1600m$



distâncias nas direções x e z são muito diferentes ($\approx 3200m$ e $200m$, respectivamente), fazendo com que a aproximação dos contornos tendendo ao infinito seja totalmente inadequada.

Figura 5.7: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Hanford. (b) $x = 3200m$

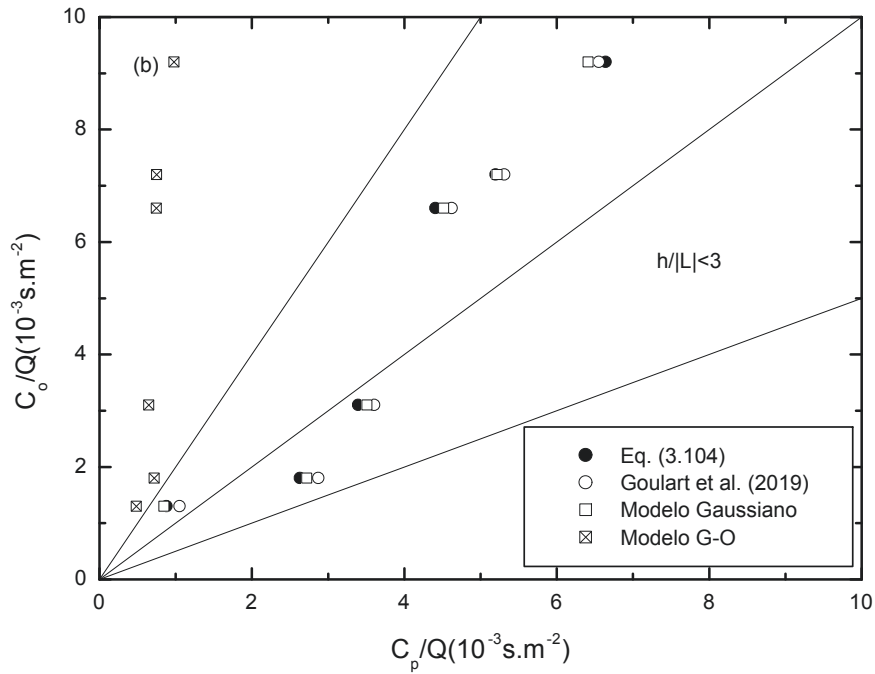
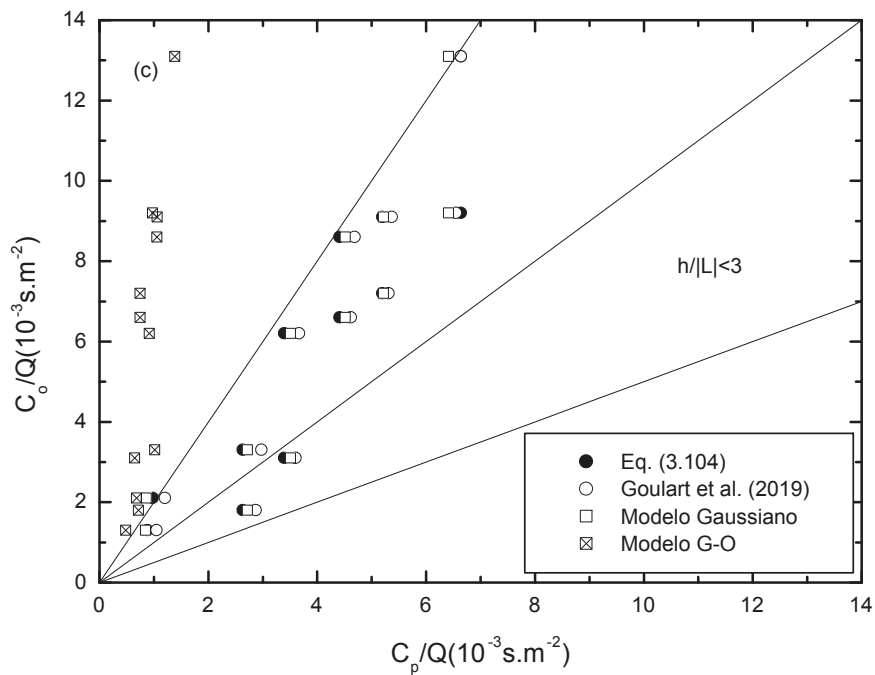


Figura 5.8: Diagrama de dispersão da concentração observada e prevista para o experimento de Hanford. (c) $x \geq 1600m$



5.2 Resultados para $\frac{h}{|L|} > 10$

Tabela 8: Experimento de Copenhagen para $\frac{h}{|L|} > 10$ (instável)

Modelo	Cor	NMSE	FS	FB	FA2
Eq. 3.104	0.62	0.30	1.08	-0.29	0.91
Goulart et al. (2019)	0.65	0.20	0.97	-0.14	0.90
Modelo Gaussiano	0.62	0.34	1.02	-0.33	0.81

Para $\frac{h}{|L|} > 10$ a tabela 9 mostra que o modelo fracionário proposto com $\alpha = 0.72$ tem melhor performance quando comparado com o modelo Gaussiano na maioria dos índices estatísticos. Como no caso anterior, analisou-se a solução do modelo proposto com α variando de 0.50 a 0.99 em passos de 0.01, e verificou-se que o modelo (com velocidade do vento constante e coeficiente de difusão constante) descreve relativamente bem todos os experimentos com $\alpha = 0.72$ quando $\frac{h}{|L|} > 10$. Observou-se também que a performance de todos os modelos com $\frac{h}{|L|} > 10$ é pior do que o desempenho quando $\frac{h}{|L|} < 10$ (Tabelas 6, 7 e 8). Isso pode estar relacionado à diferença na estrutura do fluxo turbulento na CLP em ambos os casos. Quando $\frac{h}{|L|} > 10$ um estado de convecção livre surge [44]. Neste caso, temos uma forte turbulência gerada pela convecção térmica e uma grande variação na estrutura do fluxo na direção vertical. Isso resulta em uma grande variação com a altura da intensidade do coeficiente de difusão vertical, como no experimento de Prairie Grass (instável), e casos 1, 3, 7 e 8 do experimento de Copenhagen. Por outro lado, quando $\frac{h}{|L|}$ é muito pequeno ($\frac{h}{|L|} < 10$) há uma turbulência em que a fonte mecânica (cisalhamento do vento) é relevante. Neste caso, há uma maior homogeneização espacial no escoamento. Consequentemente, há pouca variação da intensidade do coeficiente de difusão vertical com a altura [45], como em Prairie Grass (estável) e o experimento de Hanford, e também nos casos 2, 4, 5, 6 e 9 do experimento de Copenhagen.

Modelos que empregam velocidade de vento constante e difusividade turbulenta também constante terão maior dificuldade em descrever corretamente a concentração de distribuição quando há maior assimetria espacial, como no caso do fluxo na CLP se $\frac{h}{|L|} > 10$. Essa deficiência será compensada naturalmente quando a velocidade do vento e o coeficiente de difusão não constantes forem usados para descrever com mais precisão a estrutura física do escoamento. Contudo, no presente trabalho considerou-se somente velocidade do vento constante e difusividade turbulenta, pois, neste momento, estamos interessados apenas em demonstrar que a estrutura da equação diferencial de ordem fracionária é mais apropriada para calcular a distribuição de contaminantes dispersos em um fluxo turbulento do que uma equação diferencial de ordem inteira. Comparou-se o modelo gaussiano com derivadas de ordem fracionária contra o modelo gaussiano com derivadas de ordem inteira. É claro, um modelo fracionário ou de ordem não inteira, que considera uma velocidade de vento e coeficiente de difusão não constantes, que descreve de forma mais adequada a estrutura do escoamento turbulento, irá gerar valores de distribuição de concentração mais realistas. No entanto, em geral, não é simples obter uma solução analítica para ambas as equações (fracionária e inteira) para comparar facilmente seus

desempenhos.

Finalmente, um resultado muito importante encontrado é que, considerando tanto $\frac{h}{|L|} < 10$ e $\frac{h}{|L|} > 10$, deve haver uma relação entre a ordem da derivada fracionária com a estrutura física do escoamento turbulento, uma vez que, independentemente do experimento, quando temos uma predominância de entrada de energia mecânica ($\frac{h}{|L|} < 10$) todos os experimentos são melhor descritos com $\alpha = 0.54$, e quando temos uma predominância de entrada de energia por convecção térmica ($\frac{h}{|L|} > 10$) os dados experimentais são melhor descritos por $\alpha = 0.72$.

6 CONCLUSÕES

No presente trabalho, foi desenvolvido um modelo de dispersão de contaminantes na Camada Limite Planetária empregando-se a derivada de Hausdorff. Para decrever o termo difusivo foi proposto uma nova parametrização para o fluxo de concentração usando derivadas de Hausdorff. Para o termo advectivo foi usada a derivada de Hausdorff a fim de garantir que o deslocamento quadrático médio da concentração seja descrito por uma lei de potência fracionária do deslocamento. A equação diferencial de ordem fracionária nas direções longitudinal e vertical foi usada para obter a distribuição de concentração de contaminantes na Camada Limite Planetária. A utilização de derivadas fracionárias na modelagem de difusão de contaminantes é justificada pela presença de difusão anômala gerada a partir da turbulência. Nas últimas décadas, milhares de trabalhos foram realizados com o objetivo de explicar a difusão anômala. No entanto, neste assunto apenas alguns trabalhos trataram de analisar a validade de modelos baseados em equações diferenciais clássicas e/ou do uso de operadores diferenciais não usuais para descrever sistemas que apresentam comportamento não-diferencial e/ou dinâmica anômala. Neste contexto, o uso de operadores diferenciais fracionários emergiu como uma valiosa ferramenta matemática para modelar a evolução da difusão anômala [5, 6, 7]. No entanto, o uso de cálculo fracionário para estudar regimes estacionários de dispersão de contaminantes na atmosfera é, na verdade, pouco explorado. A este respeito, foi demonstrado recentemente em [37] que o regime de estado estacionário para uma distribuição espacial de concentração de contaminantes não-reativos, em um processo de difusão anômala exibindo deslocamento quadrático médio, é dado naturalmente por uma equação diferencial contendo derivadas fracionárias no termo advectivo (direção x) da equação de difusão-advectação. No presente trabalho, a equação de difusão-advectação fracionária resultante contém derivadas fracionárias de Hausdorff nos termos advectivos e difusivos (direções x e z), com isso o modelo considera difusão anômala em ambas as direções, diferentemente do modelo fracionário em [32] onde a difusão anômala era considerada apenas na direção longitudinal. Resolveu-se o modelo e comparou-se a solução com experimentos reais e com modelos com derivadas tradicionais de ordem inteira. Mostrou-se que o modelo empregando derivada de Hausdorff, mesmo com velocidade do vento constante e uma difusividade turbulenta também constante, fornece um resultado muito bom comparado aos dados experimentais. Os resultados obtidos mostram que a estrutura da equação diferencial de ordem fracionária é mais apropriada para calcular a distribuição de contaminantes dispersos em um escoamento turbulento do que uma equação diferencial de ordem inteira. Além disso, um resultado muito importante encontrado é que deve haver uma relação entre a ordem α da derivada fracionária com a estrutura física do escoamento turbulento já que, independentemente do experimento, quando temos uma predominância de entrada de energia mecânica no escoamento turbulento, todos os experimentos foram melhor descritos com $\alpha = 0.54$, e quando temos uma predominância de entrada de energia por convecção térmica, os dados experimentais são melhor descritos por $\alpha = 0.72$. Uma grande vantagem do emprego da derivada de

Hausdorff em relação ao emprego da derivada fracionária de Caputo [32, 37] é que, no caso da derivada de Hausdorff obtemos um sistema de equações diferenciais ordinárias de ordem inteira após a separação de variáveis na equação da difusão-advecção. Existe uma vasta literatura sobre a solução de equações diferenciais ordinárias de ordem inteira, diferentemente das equações diferenciais obtidas empregando-se a derivada de Caputo. Para continuidade do trabalho pretende-se encontrar uma relação matemática entre alguns parâmetros que descrevem a estrutura física do escoamento com o valor α da ordem da derivada de Hausdorff.

7 APÊNDICE

7.1 Apêndice 1 - Regras de derivação das derivadas métricas

1) Derivada métrica de uma função constante

Se f tem o valor constante $f(x) = c$, então

$$\frac{d^H f(x)}{d^H x} = \frac{d^H(c)}{d^H x} = 0$$

Demonstração. Aplica-se a definição de derivada métrica para $f(x) = c$, função cujos valores são a constante c . Para qualquer valor de x , encontra-se

$$\frac{d^H f(x)}{d^H x} = C = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{c - c}{\Delta^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} 0 = 0$$

□

2) Regra da Potência

Seja n um número inteiro positivo e $f(x) = x^n$ então, como x^n é diferenciável:

$$\frac{d^H f(x)}{d^H x} = nx^{n-1} \cdot \frac{d^H x}{d^H x}$$

Demonstração. Como f é diferenciável, usa-se o Corolário 2.3. □

3) Regra da multiplicação da derivada métrica por uma constante

Seja f uma função H-derivável (possui derivada na métrica H) de x , e c uma constante, então:

$$\frac{d^H cf(x)}{d^H x} = c \frac{d^H f(x)}{d^H x}$$

Demonstração.

$$\frac{d^H cf(x)}{d^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{cf(x_1) - cf(x_0)}{\Delta^H x} = c \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^H x} = c \frac{d^H f(x)}{d^H x}.$$

□

4) Regra da soma

Sejam f e g funções H-deriváveis de x , então a soma de $f + g$ é H-derivável em qualquer ponto em que f e g sejam H-deriváveis. Em tais pontos,

$$\frac{d^H(f + g)}{d^H x} = \frac{d^H f}{d^H x} + \frac{d^H g}{d^H x}.$$

Demonstração. Aplica-se a definição de derivada métrica para $h(x) = f(x) + g(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{d^H[f(x) + g(x)]}{d^Hx} &= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{[f(x_1) + g(x_1)] - [f(x_0) + g(x_0)]}{\Delta^Hx} \\ &= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \left[\frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^Hx} + \frac{g(x_1) - g(x_0)}{\Delta^Hx} \right] \\ &= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^Hx} + \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{\Delta^Hx} = \frac{d^Hf}{d^Hx} + \frac{d^Hg}{d^Hx}. \end{aligned}$$

□

Combinando a regra da soma com a regra da multiplicação por uma constante, obtém-se a **regra da diferença**, que diz que a derivada métrica de uma diferença de funções deriváveis é igual a diferença de suas derivadas métricas:

$$\frac{d^H(f - g)}{d^Hx} = \frac{d^H[f + (-1)g]}{d^Hx} = \frac{d^Hf}{d^Hx} + (-1)\frac{d^Hg}{d^Hx} = \frac{d^Hf}{d^Hx} - \frac{d^Hg}{d^Hx}.$$

5) Regra do Produto

Sejam f e g H-deriváveis em x , então o produto fg também é, e:

$$\frac{d^H(fg)}{d^Hx} = f \frac{d^Hg}{d^Hx} + g \frac{d^Hf}{d^Hx}.$$

Demonstração.

$$\frac{d^H(fg)}{d^Hx} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1)g(x_1) - f(x_0)g(x_0)}{\Delta^Hx}$$

Transforma-se a fração acima em uma equivalente, subtraindo e adicionando $f(x_1)g(x_0)$ ao numerador:

$$\begin{aligned} \frac{d^H(fg)}{d^Hx} &= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1)g(x_1) - f(x_1)g(x_0) + f(x_1)g(x_0) - f(x_0)g(x_0)}{\Delta^Hx} \\ &= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \left[f(x_1) \frac{g(x_1) - g(x_0)}{\Delta^Hx} + g(x_0) \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^Hx} \right] \\ &= f(x) \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{\Delta^Hx} + g(x_0) \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^Hx} = f \frac{d^Hg}{d^Hx} + g \frac{d^Hf}{d^Hx}. \end{aligned}$$

□

6) Regra do Quociente

Sejam f e g funções e h a função definida por $h(x) = f(x)/g(x)$, onde $g(x) \neq 0$. Se $\frac{d^Hf(x)}{d^Hx}$ e $\frac{d^Hg(x)}{d^Hx}$ existem, então

$$\frac{d^H h(x)}{d^H x} = \frac{g(x) \frac{d^H f(x)}{d^H x} - f(x) \frac{d^H g(x)}{d^H x}}{[g(x)]^2}$$

Demonstração. Por hipótese, existem

$$\frac{d^H f(x)}{d^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^H x} \text{ e } \frac{d^H g(x)}{d^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{\Delta^H x}$$

E assim,

$$\frac{d^H h(x)}{d^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{h(x_1) - h(x_0)}{\Delta^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{\frac{f(x_1)}{g(x_1)} - \frac{f(x_0)}{g(x_0)}}{\Delta^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{1}{\Delta^H x} \frac{f(x_1)g(x_0) - f(x_0)g(x_1)}{g(x_1)g(x_0)}$$

Subtraindo e adicionando $f(x_0)g(x_0)$ ao numerador, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d^H f(x)}{d^H x} &= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{1}{\Delta^H x} \frac{f(x_1)g(x_0) - f(x_0)g(x_0) + f(x_0)g(x_0) - f(x_0)g(x_1)}{g(x_1)g(x_0)} \\ &= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \left[\frac{\frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^H x} g(x_0) - f(x_0) \frac{g(x_1) - g(x_0)}{\Delta^H x}}{g(x_1)g(x_0)} \right] \\ &= \frac{\lim_{x_1 \rightarrow x_0} g(x_0) \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^H x} - \lim_{x_1 \rightarrow x_0} f(x_0) \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{\Delta^H x}}{\lim_{x_1 \rightarrow x_0} g(x_1) \lim_{x_1 \rightarrow x_0} g(x_0)} \\ &= \frac{g(x) \frac{d^H f(x)}{d^H x} - f(x) \frac{d^H g(x)}{d^H x}}{g(x)g(x)} = \frac{g(x) \frac{d^H f(x)}{d^H x} - f(x) \frac{d^H g(x)}{d^H x}}{[g(x)]^2} \end{aligned}$$

□

7) Regra da cadeia

Sejam $y = g(u)$, $u = f(x)$ e as derivadas dy/du e $d^H u/d^H x$ existem, então a função composta $y = g[f(x)]$ tem derivada que é dada por

$$\frac{d^H y}{d^H x} = \frac{dy}{du} \cdot \frac{d^H u}{d^H x}$$

Demonstração Parcial. Suponha que existe um intervalo I contendo x , tal que $f(x_1) - f(x_0) \neq 0$.

Como $y = g[f(x)]$, e g é diferenciável, tem-se que:

$$\frac{d^H g[f(x)]}{d^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g[f(x_1)] - g[f(x_0)]}{\Delta^H x} = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g[f(x_1)] - g[f(x_0)]}{f(x_1) - f(x_0)} \cdot \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^H x}$$

$$= \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g[f(x_1)] - g[f(x_0)]}{f(x_1) - f(x_0)} \cdot \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta^H x} = g'(x_0) \cdot \frac{d^H f(x_0)}{d^H x}$$

□

8 REFERÊNCIAS

- [1] Richardson, L.F., **Atmospheric diffusion shown on a distance distance-neighbour graph.** Proc. R. Soc. Lond. A. 110, 709-737, 1926.
- [2] Maliska, C.R., **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** 2º ed. Rio de Janeiro:LTC, 2004, 453 p.
- [3] Stull, R.B., **An introduction to boundary layer meteorology.** Dordrecht: Academic Publishers, 1988, 666 p.
- [4] Monin, A.S., Yaglom, A.M., **Statistical fluid mechanics.** Mit Press, Cambridge, 1971.
- [5] Metzler, R. and Klafter, J., **The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach.** Physics Reports 339, 1 - 77, 2000.
- [6] Metzler, R. and Klafter, J., **The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics.** J. Phys. A: Math. Gen. 37, R161, 2004.
- [7] West, B.J., **Fractional calculus view of complexity: A tutorial.** Reviews of modern physics, volume 86, outubro-dezembro 2014.
- [8] Gryning,S.E., Holtslag A.M.M., Irwin J.S., Sivertsen B., **Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters.** Atmos, Environ, 21, 79 - 89, 1987.
- [9] Hanna, S.R., Paine R.J., **Hybrid plume dispersion model (hpdm) development and evaluation.** J. Appl, Meteorol, 28, 206 - 224, 1989.
- [] Hanna, S.R., **Applications in Air Pollution Modelling.** Editado por Nieuwstadt, F.T.M. e Van Dop, H. **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling,** Reidel Publishing Co., Dordrecht, Holland, 275 - 310, 1982.
- [10] Carvalho, J.C., Nichimura, E.R., de Vilhena, M.T.M.B., Moreira, D.M., Degrazia, G.A., **An iterative Langevin solution for contaminant dispersion simulation using the Gram–Charlier PDF** Environ. Model. and Software 20, 285–289, 2005.
- [11] Moreira, D.M., Rizza U., Vilhena M.T., Goulart A., **Semi-analytical model for pollution dispersion in the planetary boundary layer.** Atmos, Environ, 39, 2689–2697, 2005.
- [12] Wilson J.D., Sawford B.L., **Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere.** Bound.-Layer Meteorol, 78, 191–210, 1996.
- [14] Taylor, G.I. , **Diffusion by continuous movements.** Proc. Lond. Math. Soc. 20 196–212, 1921

- [15] Batchelor, G.K., **Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis.** Aust. J. Sci. Res. 2, 437–450, 1949.
- [15] Degrazia, G.A., Anfossi, D., Carvalho, J.C., Mangia, C., Tirabassi, T., **Turbulence parameterization for pbl dispersion models in all stability conditions.** Atmos. Environ. 34, 3575–3583, 2000.
- [17] Goulart, A. , D.M. Moreira, J.C. Carvalho, T. Tirabassi, **Derivation of eddy diffusivities from an unsteady turbulence spectrum.** Atmos. Environ. 38, 6121–6124, 2004.
- [18] Csanady, G.T., **Turbulent Diffusion in the Environment.** D. Reidel Publishing, Holland, 1973.
- [19] Blackadar, A.K., **Turbulence and Diffusion in the Atmosphere: Lectures in Environmental Sciences.** Springer, Berlin, 1997.
- [20] Mandelbrot, B., **Objetos fractais: forma, acaso e dimensão.** Lisboa, Gradiva, 1991.
- [21] Bassalo, J.M.F., **Crônicas da física.** Belem, UFP, 1994.
- [22] Serra, C.P., **Fractais gerados por sistemas dinâmicos complexo.** Curitiba, Champagnat, 1997.
- [23] Weberszpil, J., **Variational Approach and Deformed Derivatives.** Rio de Janeiro, UFRRJ-IM/PPGMMC, CBPF, 2015.
- [24] Domingues, H.H., **Espaços métricos e introdução à topologia,** São Paulo, Atual, 1982.
- [25] Lima, E.L., **Espaços métricos.** Rio de Janeiro, Associação Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada, 2003.
- [26] Falconer, K., **Fractal geometry: mathematical foundations and applications.** John Wiley & Sons, 2004.
- [27] Protter, M.H., **Basic elements of real analysis.** Springer, 1991.
- [28] Hunt, B.R., **The Hausdorff dimension of graphs of weierstrass functions.** Proceeding of the American Mathematical Society Volume 126, number 3, March 1998, Pages 791-800, S 0002-9939(98)04387-1
- [29] Wen, C. et al **Nom-Euclidian distance fundamental solution of Hausdorff derivative partial diferencial equations.** Engineering Analusis with Boundary Elements 84 (2017) 213-219.

- [30] Li, J., Ostoja-Starzewski M., **Hydrodynamics of fractal continuum flow and Map of a Fluid flow in fractal porous medium into fractal continuum flow.** Phys Rev E 2013;88(5):057001.
- [31] Pasquill, F., Smith, F.B., **Atmospheric Diffusion.** Halsted Press, USA, 1983.
- [32] Seinfeld, J.H., **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution.** Wiley-Interscience Publishing, USA, 1986.
- [33] Goulart, A.G.O., Lazo, M.J., Suarez, J.M.S.; Moreira, D.M. **Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants.** Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 477, p. 9-19, 2017.
- [34] Gryning, S.E., Lyck, E., **Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experimental and model calculations.** Journal of Climate and Applied Meteorology. 23, 651 - 654. 1984.
- [35] Barad, M.L., **Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion.** Geophysical Research Paper No. 59, Vols. I and II, AFCRL-TR-58-235 (ASTIA Document No. AF-15572), Air Force Cambridge Research Laboratories, Bedford, England, 1958.
- [36] Meneses, L. R., **Desenvolvimento de um modelo semi-lagrangiano para simular a dispersão de poluentes na atmosfera.** Tese (doutorado), Universidade Federal do Paraná, Setores de Tecnologia e Ciências Exatas, Programa de Pós-graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, Curitiba, 2015.
- [37] Doran, J. C., Horst, T. W. **An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer fiel measurements.** Atmospheric Environment, vol. 19, pp. 939 - 951, 1985.
- [38] Goulart, A.G.O., Lazo, M.J., Suarez, J.M.S. **A new parameterization for the concentration flux using the fractional calculus to model the dispersion of contaminants in the Planetary Boundary Layer.** Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 518, p. 38-49, 2019.
- [39] Arya, S.P., **Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds,** J. Appl. Meteorol. 34, 1112-1122, 1995.
- [40] Nickola, P.W., **The Hanford 67-Series: a volume of atmospheric diffusion measurements.** PNL-2433, Battelle,Pacific Northwest Laboratory, Richland, USA, 1977.
- [41] Obukhov, A.M., **Turbulence in an atmosphere with a non-uniform temperature.** Boundary-Layer Meteorology. 2: 7 - 29, 1971.
- [42] Moreira, D.M., Vilhena, M.T., Tirabassi, T., Buske, D., Cotta, R., **Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method.** Atmospheric Environment. 39 6289 - 6294, 2005.

- [43] Wortmann, S., Vilhena, M.T., Moreira, D.M., Buske, D., **A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL.** Atmos. Environ. 39, 2171 - 2178, 2005.
- [44] Kumar, P. e Sharan, M., **Parametrization of the eddy diffusivity in a dispersion model over homogeneous terrain in the atmospheric boundary layer.** Atmospheric Research 106, 30 - 43, 2012.
- [45] Wyngaard, J.C., **Turbulence in the Atmosphere.** Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
- [46] Pleim, J.E., Chang, J.S., **A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer.** Atmos. Environ. 26A, 965 - 981, 1992.