

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

**ESTUDO NUMÉRICO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA
ATMOSFERA EMPREGANDO O CÁLCULO FRACIONÁRIO**

por

Jaqueline Willian Scotton

Tese de Doutorado apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de
Doutor em Modelagem Computacional

Orientador: Dr. Antonio Gledson Oliveira Goulart

Coorientador: Dr. Julian Moises Seije Suarez

Rio Grande, 2022

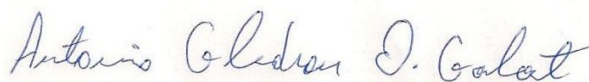
Jaque Willian Scotton

“Estudo Numérico da Dispersão de Poluentes na Atmosfera empregando o Cálculo Fracionário”

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

Aprovada em:

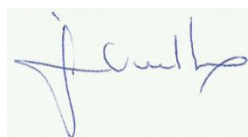
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart (Orientador – FURG)



Prof. Dr. Julian Moises Seije Suarez (Coorientador – FURG)



Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho (UFPel)

Documento assinado digitalmente
gov.br Barbara Denicol do Amaral Rodriguez
Data: 14/03/2022 09:52:53-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Profª. Dra. Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez (FURG)



Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo (FURG)

Rio Grande - RS
2022

Ficha Catalográfica

S431e Scotton, Jaque Willian.

Estudo numérico da dispersão de poluentes na atmosfera
empregando o cálculo fracionário / Jaque Willian Scotton. – 2022.
101 f.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Rio Grande –
FURG, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional,
Rio Grande/RS, 2022.

Orientador: Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart.

Coorientador: Dr. Julian Moises Seije Suarez.

1. Dispersão de Poluentes 2. Camada Limite Planetária
3. Cálculo Fracionário I. Goulart, Antônio Gledson de Oliveira
II. Suarez, Julian Moises Seije III. Título.

CDU 519.672

Catálogo na Fonte: Bibliotecário José Paulo dos Santos CRB 10/2344

À Alice, a razão de tudo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço:

Ao professor Antonio Gledson Oliveira Goulart pela orientação, por todo o apoio e pelo incentivo durante o desenvolvimento deste trabalho e por me oportunizar a realização do curso de Doutorado no PPGMC da FURG.

Ao professor Julian Moises Seije Suarez que teve contribuição decisiva na realização deste trabalho, com as suas orientações.

À minha companheira Graziela, à minha filha Alice e aos meus demais familiares pelo carinho, pelo incentivo e, principalmente, pela paciência, os quais sempre estiveram ao meu lado mesmo recebendo pouca atenção.

A todos os professores do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da FURG pela colaboração com a minha formação.

Às amigas Glauciléia Magalhães, Laísa Soares, Ellen Moresco e Fernanda Montibeler e ao amigo Eliezer Balbinot pelo carinho e por todo o incentivo ao longo deste percurso.

Ao PPGMC e à FURG pela oportunidade e pela disponibilização dos recursos necessários para o desenvolvimento da pesquisa.

À CAPES pelo suporte financeiro.

Enfim, a todos que, de uma forma ou de outra, contribuíram com a realização deste trabalho.

RESUMO

Neste trabalho, são apresentadas simulações bidimensionais e tridimensionais da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária empregando a equação da advecção-difusão com derivadas fracionárias, considerando as definições de Riemann-Liouville e de Caputo, visando verificar as potencialidades dos modelos fracionários baseados em cada uma dessas definições na descrição da dispersão de contaminantes na atmosfera. Os resultados obtidos são confrontados com os dados dos experimentos de Copenhagen (condições atmosféricas instáveis), de Prairie-Grass (condições atmosféricas instáveis e estáveis) e de Hanford (condições atmosféricas estáveis) e mostram que o emprego de derivadas com ordens diferentes das utilizadas na equação da advecção-difusão clássica levam a resultados melhores tanto para os experimentos realizados sob condições estáveis quanto para os realizados sob condições instáveis.

Palavras-chaves: Dispersão de poluentes, Camada Limite Planetária, Cálculo Fracionário.

ABSTRACT

This study presents two- and three-dimensional simulations of pollutant dispersion in the Planetary Boundary Layer using the advection-diffusion equation with fractional derivatives, considering the definitions of Riemann-Liouville and of Caputo, to assess the potential of fractional models based on each of these definitions of atmospheric contaminant dispersion. The results are compared with experimental data from Copenhagen (unstable atmospheric conditions), from Prairie-Grass (stable and unstable atmospheric conditions) and from Hanford (stable atmospheric conditions). Results show that using derivatives with orders different from those used in the classical advection-diffusion equation lead to better results for experiments performed under stable conditions as well as for those performed under unstable conditions.

Palavras-chaves: Pollutant dispersion, Planetary Boundary Layer, Fractional Calculus.

ÍNDICE

1	MOTIVAÇÃO/JUSTIFICATIVA	16
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	17
2.1	Objetivos	23
3	DADOS UTILIZADOS PARA A VALIDAÇÃO DOS RESULTADOS	25
3.1	Experimento de Copenhagen	25
3.2	Experimento de Prairie-Grass	26
3.3	Experimento de Hanford	26
3.4	Índices Estatísticos	29
4	IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DOS MODELOS	31
4.1	Problema estacionário de advecção-difusão unidimensional	31
4.1.1	Discretização	31
4.1.2	Resultados	33
4.2	Malhas para as simulações da dispersão de poluentes na atmosfera	34
4.3	Condições de contorno	35
4.4	Coeficientes de difusão e perfil de velocidade	36
4.5	Discretização das equações para simular a dispersão de poluentes na atmosfera	38
4.5.1	Fórmulas para aproximar numericamente as derivadas fracionárias	38
4.5.2	Modelo 2D com derivadas fracionárias de Caputo no termo advectivo	39
4.5.3	Modelo 2D com derivadas fracionárias de Caputo no termo difusivo	40
4.5.4	Modelo 2D com derivadas fracionárias de Caputo nos termos advectivo e difusivo	41
4.5.5	Modelo 2D com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville no termo advectivo	42
4.5.6	Modelo 2D com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville no termo difusivo	43
4.5.7	Modelo 2D com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville nos termos advectivo e difusivo	44
4.5.8	Modelo 3D com derivadas fracionárias de Caputo nos termos advectivo e difusivos	45
4.6	Testes de independência de malha	47
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	50
5.1	Modelos 2D com derivadas fracionárias no termo advectivo	51
5.2	Modelos 2D com derivadas fracionárias no termo difusivo	57
5.3	Modelos 2D com derivadas fracionárias nos termos advectivo e difusivo	67
5.4	Modelo 3D com derivadas fracionárias nos termos advectivo e difusivo	79
6	CONCLUSÕES	91
7	REFERÊNCIAS	93
8	ANEXOS	98

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Camada Limite Planetária (Stull, 1988).	17
Figura 3.1: Experimento de Copenhagen (Gryning; Lyck, 1984).	25
Figura 3.2: Experimento de Prairie-Grass (Barad, 1958).	27
Figura 4.1: Ilustração da malha unidimensional.	32
Figura 4.2: SN: Solução Numérica para $\alpha = 0.999$; SA: Solução Analítica para $\alpha = 1$	33
Figura 4.3: Resultados numéricos para $u = 3$ e diferentes valores de α	34
Figura 4.4: Comparação dos erros absolutos máximos entre as soluções numéricas e as soluções analíticas para diferentes tipos de malha.	35
Figura 4.5: Refinamentos da malha: (a) Plano xz ; (b) Plano xy ; (c) Plano yz	35
Figura 5.1: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.	51
Figura 5.2: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	53
Figura 5.3: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.	55
Figura 5.4: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	55
Figura 5.5: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	58
Figura 5.6: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.	58
Figura 5.7: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	59
Figura 5.8: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.	59
Figura 5.9: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.	61
Figura 5.10: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	61
Figura 5.11: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	63

Figura 5.12: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.	63
Figura 5.13: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen. . . .	65
Figura 5.14: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	65
Figura 5.15: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	66
Figura 5.16: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.	66
Figura 5.17: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen. . . .	69
Figura 5.18: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen. . .	69
Figura 5.19: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	72
Figura 5.20: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	72
Figura 5.21: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	75
Figura 5.22: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	75
Figura 5.23: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.	77
Figura 5.24: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.	77
Figura 5.25: Comparação entre os resultados numéricos do modelo tridimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.	81
Figura 5.26: Comparação entre os resultados numéricos do modelo tridimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	84
Figura 5.27: Comparação entre os resultados numéricos do modelo tridimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	86

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1:	Classes de estabilidade de Pasquill* (Turner, 1970).	18
Tabela 3.1:	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen	26
Tabela 3.2:	Parâmetros micrometeorológicos dos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis.	27
Tabela 3.3:	Parâmetros micrometeorológicos dos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas estáveis.	28
Tabela 3.4:	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford.	28
Tabela 4.1:	Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Copenhagen.	47
Tabela 4.2:	Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	48
Tabela 4.3:	Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	48
Tabela 4.4:	Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Hanford.	48
Tabela 4.5:	Teste de independência de malha para as simulações tridimensionais do Experimento de Copenhagen.	49
Tabela 4.6:	Teste de independência de malha para as simulações tridimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	49
Tabela 4.7:	Teste de independência de malha para as simulações tridimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	49
Tabela 5.1:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento de Copenhagen.	52
Tabela 5.2:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).	53
Tabela 5.3:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento Copenhagen.	54
Tabela 5.4:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).	54
Tabela 5.5:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	56
Tabela 5.6:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento de Hanford.	57
Tabela 5.7:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis).	60
Tabela 5.8:	Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento de Hanford.	60

Tabela 5.9: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Copenhagen.	62
Tabela 5.10: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).	62
Tabela 5.11: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis).	64
Tabela 5.12: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Hanford.	64
Tabela 5.13: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Hanford, de 100m a 800m de distância da fonte.	67
Tabela 5.14: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Hanford, de 1600m a 3200m de distância da fonte.	67
Tabela 5.15: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Copenhagen.	68
Tabela 5.16: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento Copenhagen.	68
Tabela 5.17: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Copenhagen, a diferentes distâncias da fonte.	70
Tabela 5.18: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).	71
Tabela 5.19: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).	73
Tabela 5.20: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis) para diferentes distâncias da fonte.	74
Tabela 5.21: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis).	76
Tabela 5.22: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	76
Tabela 5.23: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis), a diferentes distâncias da fonte.	78
Tabela 5.24: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento de Hanford.	79
Tabela 5.25: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento de Hanford.	79
Tabela 5.26: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento de Hanford, a diferentes distâncias da fonte.	80
Tabela 5.27: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhagen.	81

Tabela 5.28: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhagen, de 1900m a 2100m de distância da fonte.	82
Tabela 5.29: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhagen, de 3600m a 4200m de distância da fonte.	83
Tabela 5.30: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhagen, de 5300m a 6100m de distância da fonte.	83
Tabela 5.31: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).	84
Tabela 5.32: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis), de 50m a 200m de distância da fonte.	85
Tabela 5.33: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis), de 400m a 800m de distância da fonte.	85
Tabela 5.34: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).	86
Tabela 5.35: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) à 50m de distância da fonte.	87
Tabela 5.36: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) à 200m de distância da fonte.	88
Tabela 5.37: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) à 800m de distância da fonte.	88
Tabela 5.38: Comparação entre os melhores resultados de cada modelo.	89
Tabela 8.1: Concentrações integradas lateralmente (C^y/Q) e concentrações máximas (C_{max}/Q) observadas no experimento de Copenhagen.	98
Tabela 8.2: Concentrações integradas lateralmente, C^y (g/m ²), observadas nos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis.	99
Tabela 8.3: Concentrações máximas, C_{max} (10 ⁻³ g/m ³), observadas nos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis.	100
Tabela 8.4: Concentrações integradas lateralmente, C^y (g/m ²), e Concentrações máximas, C_{max} (10 ⁻³ g/m ³), observadas nos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas estáveis.	101
Tabela 8.5: Concentrações de SF_6 integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão, C^y/Q (s/m ²), registradas no experimento de Hanford.	101

LISTA DE SÍMBOLOS

C	Concentração de poluente (g/m^3)
C_o	Concentração observada em experimentos
C_p	Concentração predita em simulações
C^y	Concentração de poluente integrada lateralmente (g/m^2)
C_0	Condição de contorno em $x = 0$
C_L	Condição de contorno em $x = L_x$
C_{max}	Concentração máxima de poluente (g/m^3)
${}^C D^\alpha f$	Derivada fracionária de Caputo de ordem α da função f
${}_{RL} D^\alpha f$	Derivada fracionária de Riemann-Liouville de ordem α da função f
$f^{(\alpha)}$	Derivada fracionária de Grünwald-Letnikov de ordem α da função f
H_s	Altura da fonte (m)
K	Coeficiente de difusão (m^2/s)
K_x	Coeficiente de difusão turbulenta na direção x (m^2/s)
K_y	Coeficiente de difusão turbulenta na direção y (m^2/s)
K_z	Coeficiente de difusão turbulenta na direção z (m^2/s)
L	Comprimento de Monin-Obukhov (m)
L_s	Posição da fonte em relação ao eixo y (m)
L_x	Extremidade do domínio computacional em relação a x (m)
L_y	Extremidade do domínio computacional em relação a y (m)
L_z	Extremidade do domínio computacional em relação a z (m)
Q	Taxa de emissão de contaminante (g/s)
S	Termo fonte ($\text{g/m}^3\text{s}$)
t	Tempo (s)
T_z	Perfil de temperatura em relação a z ($^\circ\text{C}$)
u	Velocidade na direção x (m/s)
u_*	Velocidade de fricção (m/s)
U_{ref}	Velocidade do vento medida na altura de referência z_{ref} (m/s)
v	Velocidade na direção y (m/s)
w	Velocidade na direção z (m/s)
b_p^α	Coeficientes do algoritmo L1
w_*	Escala de velocidade vertical (m/s)
x	Eixo longitudinal (m)
y	Eixo transversal (m)
y_i	Dimensão do domínio em relação ao eixo y (m)
z	Eixo vertical (m)
z_i	Altura da CLP (m)

Símbolos gregos

α	Ordem das derivadas
δ	Função Delta de Dirac
Δx	Distância entre dois pontos da malha em x (m)
Δy	Distância entre dois pontos da malha em y (m)
Δz	Distância entre dois pontos da malha em z (m)
Γ	Função Gama
κ	Constante de Von-Kármán
σ_o	Desvio padrão das concentrações observadas em experimentos
σ_p	Desvio padrão das concentrações preditas em simulações

LISTA DE SIGLAS

C-ADF	Derivadas de Caputo nos termos Advectivo e Difusivo
C-AF	Derivada de Caputo no termo Advectivo
CC	Coefficiente de Correlação
C-DF	Derivada de Caputo no termo Difusivo
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
CR	Camada Residual
CS	Camada Superficial
ER	Erro Relativo
ER_{max}	Erro Relativo Máximo
FA2	Fator de dois
FB	Fator de inclinação
FS	Desvio fracional padrão
NMSE	Erro Quadrático Médio Normalizado
RL-ADF	Derivadas de Riemann-Liouville nos termos Advectivo e Difusivo
RL-AF	Derivada de Riemann-Liouville no termo Advectivo
RL-DF	Derivada de Riemann-Liouville no termo Difusivo
SA	Solução Analítica
SF_6	Hexafluoreto de enxofre
SN	Solução Numérica
SO_2	Dióxido de enxofre
Z_nS	Sulfeto de zinco

1 MOTIVAÇÃO/JUSTIFICATIVA

A poluição atmosférica tem sido um tema presente em inúmeros debates nas últimas décadas, seja pelo efeito da qualidade do ar na saúde humana, seja pela relação entre os gases liberados e o aquecimento global, apontado por diversos especialistas como potencial causador de mudanças climáticas. Nesse sentido, o desenvolvimento de estudos experimentais ou teóricos sobre a dispersão de poluentes na atmosfera é de grande importância para avaliar as fontes atualmente em utilização e apresentar alternativas eficientes que visem a redução dos danos causados pela poluição excessiva. Dentro desse contexto, o que se apresenta neste trabalho é um estudo onde simulações numéricas da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária sob condições instáveis e estáveis foram realizadas, com o diferencial de que, em vez da equação da advecção-difusão clássica (que é frequentemente utilizada para modelar este tipo de problema), a modelagem proposta baseou-se na equação da advecção-difusão fracionária, cujas ordens das derivadas são números não inteiros. Cabe destacar que uma das vantagens da utilização de operadores diferenciais de ordem fracionária está no fato de que estes são operadores não locais, onde as derivadas fracionárias de uma função f em relação a x , num ponto x_0 em $[a, b]$, por exemplo, dependem dos valores de f em todo o intervalo $[a, b]$ ($[a, x_0]$ no caso de derivada à esquerda; $[x_0, b]$ no caso de derivada à direita). No caso da derivada fracionária no tempo, em particular, temos que a derivada da função num determinado instante t depende de todos os instantes anteriores a partir do inicial. Essa característica de não localidade dos operadores é de grande relevância para problemas de difusão anômala, os quais conforme bem documentado na literatura (Sabatier; Agrawal; Tenreiro Machado, 2007; Zhou, 2014; Podlubny, 1999; Camargo; Oliveira, 2015), podem ser modelados por equações diferenciais fracionárias. Diante disso, uma vez que na atmosfera terrestre o escoamento é turbulento e, conforme já foi observado por Richardson (1926), apresenta um comportamento anômalo, faz então sentido supor que a equação da advecção-difusão com derivadas de ordens fracionárias seja capaz de descrever a dispersão de poluentes na atmosfera com maior precisão do que a equação clássica, cujas derivadas têm ordens inteiras.

Uma vez que a aplicação do Cálculo Fracionário a estudos de dispersão de poluentes na atmosfera é algo recente e tem demonstrado um grande potencial, com resultados promissores (Meerschaert; Tadjeran, 2004; Momani, 2007; Liu et al., 2007; Ray, 2008; Goulart et al., 2017; Tayebi; Shekari; Heydari, 2017; Moreira; Moret, 2018; Goulart; Lazo; Suarez, 2019; Moreira et al., 2019; Goulart; Lazo; Suarez, 2020), no presente trabalho, segue-se essa linha e apresenta-se uma nova forma de modelar o fenômeno da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária. Nesse contexto, são apresentadas simulações numéricas, bidimensionais e tridimensionais, da dispersão de poluentes nas Camadas Limites Convectiva e Estável, empregando a equação da advecção-difusão fracionária, com base nas definições de Riemann-Liouville e de Caputo, visando verificar as potencialidades dos modelos fracionários baseados em cada uma dessas definições na descrição da dispersão atmosférica de contaminantes.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A região da atmosfera onde ocorre a maioria dos fenômenos de transporte e dispersão de contaminantes é denominada Camada Limite Planetária (CLP) ou Camada Limite Atmosférica (CLA), a qual é caracterizada por uma intensa turbulência que pode ter origem mecânica ou convectiva e que, conforme Stull (1988), é a parte da troposfera que sofre influências diretas da superfície terrestre, que responde aos forçantes desta numa escala de tempo de uma hora ou menos e cuja espessura varia de alguns metros até poucos quilômetros, dependendo do período do dia, das características do terreno, ou até mesmo dos níveis de insolação.

De acordo com o aquecimento da superfície terrestre, a CLP é frequentemente categorizada como instável (ou convectiva), neutra ou estável, tendo-se as chamadas transições da camada limite quando a incidência da radiação solar é adicionada ou removida, o que ocorre respectivamente no amanhecer e no pôr do sol. No amanhecer, a transição se dá através do desenvolvimento de uma Camada Limite Convectiva (CLC), que é caracterizada por uma forte mistura vertical devida às trocas de calor por convecção ocasionadas pelo aquecimento da superfície da Terra pelo sol e cuja estrutura envolve três outras camadas: Camada Superficial (CS); Camada de Mistura (CM); e Zona de Entranhamento. No fim da tarde/início da noite, entretanto, a transição se caracteriza pelo decaimento da energia cinética turbulenta, uma vez que a radiação solar incidente na superfície terrestre cessa e isso faz com que a turbulência, predominantemente convectiva durante o dia, decaia e torne-se essencialmente mecânica. Esse decaimento da turbulência convectiva dá origem à Camada Limite Estável (CLE ou CE), que começa a formar-se no pôr do sol, próxima à superfície terrestre, e à Camada Residual (CR), acima da CLE. A estrutura da CLP é mostrada na Fig. 2.1.

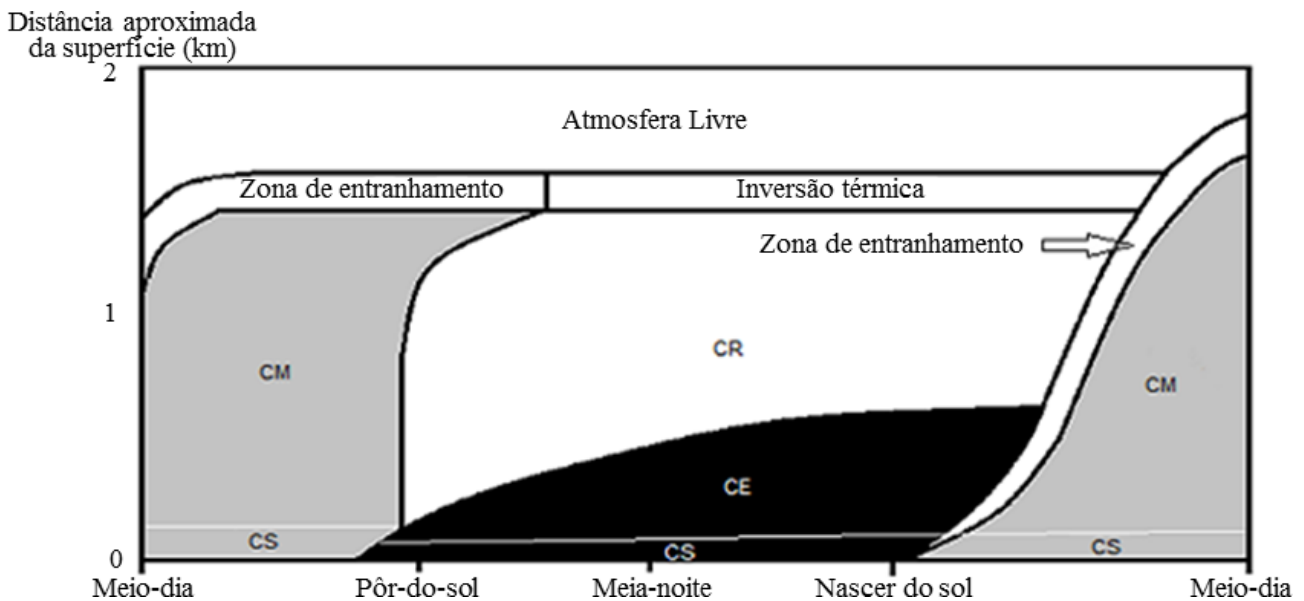


Figura 2.1: Camada Limite Planetária (Stull, 1988).

Existem diferentes formas de classificar a CLP como estável, neutra ou instável. Uma delas é com base no perfil vertical de temperatura, T , onde para uma atmosfera neutra tem-se que

a taxa de decaimento de T com a altura é de aproximadamente $0.98^\circ\text{C}/100\text{m}$. Quando a taxa de decaimento da temperatura é maior do que esse valor, tem-se uma atmosfera instável e, nos demais casos (quando a taxa de decaimento é menor do que $0.98^\circ\text{C}/100\text{m}$ ou quando T simplesmente não varia ou, até mesmo, cresce com a altura), tem-se que a atmosfera é estável (Seinfeld; Pandis, 2006). Outra forma de avaliar a estabilidade da atmosfera é por meio da classificação de Pasquill, que se baseia não somente nos efeitos da temperatura, levando em conta a radiação solar (no caso diurno) e a cobertura de nuvens (no caso noturno), mas também na influência da velocidade do vento. A Tab. 2.1 apresenta uma das formas de realizar essa classificação.

Tabela 2.1: Classes de estabilidade de Pasquill* (Turner, 1970).

U_{10} [m/s]	Radiação solar [W/m^2] (dia)			Fração de nuvens (noite)	
	Forte (> 700)	Moderada ($350 - 700$)	Fraca (< 350)	$\geq 4/8$	$\leq 3/8$
< 2	A	A – B	B	—	—
$2 - 3$	A–B	B	C	E	F
$3 - 5$	B	B – C	C	D	E
$5 - 6$	C	C – D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

* A – Extremamente instável; B – Moderadamente instável;
C – Fracamente instável; D – Neutra; E – Fracamente estável;
F – Moderadamente estável.

Além das classes de Pasquill, a classificação da atmosfera também pode ser realizada com base no comprimento de Monin-Obukhov (L), definido por (Stull, 1988)

$$L = \frac{\theta_v u_*^3}{\kappa g (\overline{w'\theta'_v})_w} \quad (2.1)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, g é a aceleração da gravidade, θ_v é a temperatura potencial virtual, κ é a constante de Von-Kármán e $(\overline{w'\theta'_v})_w$ é o fluxo de calor na superfície. L exprime a razão entre os fluxos turbulentos de origem mecânica e convectiva e pode ser interpretado como a altura até a qual a turbulência mecânica predomina em relação à turbulência de origem térmica. Tem-se, para $L > 0$, condições atmosféricas estáveis e, para $L < 0$, condições atmosféricas instáveis. Com base no comprimento de Monin-Obukhov, outro importante parâmetro de escala da camada superficial pode ser definido (Seinfeld; Pandis, 2006)

$$\xi = \frac{z}{L} \quad (2.2)$$

onde z é a altura (m) e L é o comprimento de Monin-Obukhov (m). Tem-se que, se $\xi < 0$, a CS é instável, se $\xi > 0$, a CS é estável e, se $\xi \rightarrow 0$, a CS é neutra (Seinfeld; Pandis, 2006).

Há fundamentalmente dois tipos de modelos que descrevem o transporte de poluentes na

atmosfera: os eulerianos, cujo sistema de referência é fixo no espaço; e os lagrangianos, cujo sistema de referência segue o movimento atmosférico médio. Neste trabalho, considera-se o equacionamento euleriano, o qual é feito com base na equação da advecção-difusão, obtida pela aplicação da técnica de decomposição de Reynolds na equação da conservação de massa (continuidade) para um escalar C (Stull, 1988). Esse procedimento, no entanto, faz surgir a necessidade de parametrização dos fluxos turbulentos de concentração (necessidade frequentemente denominada de problema de fechamento da turbulência), sendo uma das possíveis parametrizações assumir que esses fluxos turbulentos são proporcionais à magnitude do gradiente de concentração média. Nesse caso, a equação da advecção-difusão pode ser escrita como (Seinfeld; Pandis, 2006)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] + S \quad (2.3)$$

onde C é a concentração média do contaminante (g/m^3); t é o tempo (s), u , v e w são as componentes da velocidade do vento (m/s) nas direções x (longitudinal), y (lateral) e z (vertical), K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta (m^2/s) nas direções x , y e z , e S é o termo fonte ($\text{g}/\text{m}^3\text{s}$).

A dispersão de poluentes na atmosfera é, de fato, um tema muito frequente em estudos científicos, de forma que diversos trabalhos podem ser citados. Deardorff; Willis (1984) apresentaram resultados de experimentos realizados em laboratório da dispersão de poluentes em condições convectivas, liberados com e sem empuxo, visando a representação da dispersão na Camada Limite Atmosférica. Alguns anos antes, Lamb (1978) simulou numericamente o transporte de poluentes na CLC, onde o contaminante foi liberado sem empuxo de uma fonte pontual localizada na altura de $0,26z_i$, onde z_i , nesse caso, é a altura da CLC. Em seu estudo, Lamb verificou a hipótese levantada por Deardorff; Willis (1976) de que o efeito da difusão longitudinal sobre a dispersão de poluentes liberados por fontes pontuais ou em linha é insignificante e pode ser desprezado quando $u/w_* \geq 1,2$, onde u é a velocidade do vento médio e w_* é a escala de velocidade convectiva. Mais tarde, Moreira; Tirabassi; Carvalho (2005) simularam a dispersão de poluentes em situações de vento fraco, sob condições estáveis e instáveis, resolvendo a equação da advecção-difusão bidimensional e estacionária pela técnica da Transformada de Laplace, considerando a CLP como um sistema multicamadas. Wortmann et al. (2005) resolveram analiticamente pelo método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) a equação da advecção-difusão bidimensional e estacionária aplicada à dispersão de poluentes sob condições moderadamente instáveis, validando a modelagem com dados do experimento de Copenhagen, descrito por Gryning; Lyck (1984). O método GILTT também foi utilizado por Moreira et al. (2005, 2006). Moreira et al. (2005) resolveram a equação da advecção-difusão bidimensional e estacionária, aplicada à dispersão de contaminantes sob as condições convectivas do experimento de Copenhagen, considerando um coeficiente de difusão turbulenta dependente da altura da camada limite e da distância da fonte, trabalho que posteriormente foi estendido por Buske et al. (2007) para condições atmosféricas estáveis e com vento fraco. Moreira et al.

(2006), por outro lado, resolveram a equação transiente, na qual o termo de advecção vertical foi mantido a fim de representar a assimetria do escoamento turbulento. Carvalho et al. (2010), por sua vez, utilizando um modelo lagrangiano, simularam a dispersão de poluentes na atmosfera durante o pôr do sol, período do dia em que a turbulência convectiva característica da CLC começa a decair dando origem à CLE. Nottrott; Kleissl; Keeling (2013) simularam a dispersão de um escalar passivo na atmosfera empregando o modelo WRF-LES (*Weather Research and Forecast/Large-Eddy Simulation*), sob condições convectivas e neutras, e compararam seus resultados com dados de experimentos de laboratório e com outros resultados obtidos com LES. O modelo WRF-LES também foi empregado por Nunalee; Kosović; Bieringer (2014) na simulação do impacto de plumas de hexafluoreto de enxofre (SF_6) no Cinder Cone Butte (monte localizado em Idaho) em ambientes com estratificação neutra e estável. Taylor; Beare; Thomson (2014), assim como Carvalho et al. (2010), centraram seus estudos na dispersão de poluentes durante a transição da CLC para a CLE, porém fazendo simulações com modelos lagrangianos e LES. O período do pôr do sol também foi considerado no trabalho de Reis et al. (2016), que estudaram a dispersão de contaminantes durante o decaimento da turbulência pelo viés euleriano. Albani; Duda; Pimentel (2015) estudaram a dispersão de poluentes na atmosfera durante todo o ciclo da CLP, empregando um modelo baseado na equação da advecção-difusão capaz de levar em conta a evolução da CLP através da definição de perfis variáveis de velocidade do vento médio e do coeficiente de difusão turbulenta vertical, conforme a condição de estabilidade atmosférica. Mais recentemente, Stefanello et al. (2017) apresentaram um modelo analítico lagrangiano para simular a dispersão de poluentes em situações com meandros de vento. Os resultados obtidos com o modelo foram confrontados com dados do experimento de Graz, desenvolvido na cidade de Graz, na Áustria, sob condições estáveis e com vento fraco.

Como mencionado anteriormente, a advecção do vento médio e a difusão turbulenta são os dois principais mecanismos que proporcionam a dispersão de poluentes na atmosfera. Richardson (1926), entretanto, já havia verificado que a difusão turbulenta é um processo anômalo quando, ao medir as variações nas espessuras de plumas liberadas por chaminés em campos de velocidades turbulentas, observou que as larguras das plumas cresciam segundo uma lei de potência do tipo t^α , com $\alpha \geq 3$, diferentemente do que ocorre em fenômenos comuns de difusão, onde $\alpha = 1$. Richardson então inferiu que a velocidade do ar turbulento, que tem uma estrutura não diferenciável, poderia ser descrita aproximadamente pela função de Weierstrass. Mais tarde, Mandelbrot (1982) sugeriu que os campos de velocidade turbulenta são fractais, não possuindo escalas espaciais ou temporais características (West, 2014). Assim, a equação da advecção-difusão clássica não seria capaz de explicar totalmente a dispersão de contaminantes na atmosfera, uma vez que os parâmetros do sistema geralmente crescem mais rapidamente do que as soluções obtidas pelos modelos clássicos (Goulart; Lazo; Suarez, 2019). É nesse contexto que muitos trabalhos foram desenvolvidos nos últimos anos (Meerschaert; Tadjeran, 2004; Momani, 2007; Liu et al., 2007; Ray, 2008; Goulart et al., 2017; Tayebi; Shekari; Heydari, 2017; Moreira; Moret, 2018; Goulart; Lazo; Suarez, 2019; Moreira et al., 2019; Goulart; Lazo; Suarez, 2020), modificando as equações da difusão, ou da advecção-difusão, clássicas (considerando as deriva-

das com ordens arbitrárias) a fim de que elas representem com maior precisão os fenômenos de difusão anômala. É interessante mencionar também que dentre os trabalhos citados, somente os seis últimos consideraram o problema da dispersão de poluentes na atmosfera. Goulart et al. (2017) avaliaram os desempenhos de dois modelos fracionários - um com coeficiente de difusão constante e outro com coeficiente de difusão variável em função da distância longitudinal - comparativamente às suas respectivas versões clássicas (com derivadas de ordens inteiras) na representação de casos estacionários de dispersão de contaminantes na CLC. No trabalho, aplicaram derivas de Caputo (cuja definição será vista mais adiante) nos termos advectivos das equações e verificaram que as modelagens fracionárias forneceram resultados significativamente melhores do que as modelagens clássicas quando confrontados com dados do experimento de Copenhagen. Moreira; Moret (2018) apresentaram a solução analítica pelo método GILTT da equação da advecção-difusão bidimensional e estacionária, também com derivada fracionária de Caputo no termo de advecção e considerando a velocidade do vento e o coeficiente de difusão turbulenta variáveis com a altura, aplicada à dispersão de poluentes na CLP sob condições instáveis. Tayebi; Shekari; Heydari (2017), por sua vez, apresentaram um método sem malha para resolver a equação da advecção-difusão bidimensional e transiente, considerando a derivada fracionária de Caputo no termo temporal, tanto constante, de ordem α , quanto variável, de ordem $\alpha(x, y, t)$, e resolveram um problema teste, extremamente idealizado, no qual consideraram a dispersão de poluentes na atmosfera. Goulart; Lazo; Suarez (2019) generalizaram o trabalho de Goulart et al. (2017), parametrizando também o fluxo de concentração com derivada de ordem fracionária. No trabalho, mesmo considerando o coeficiente de difusão turbulenta e a velocidade do vento constantes, verificaram que a modelagem fracionária forneceu resultados muito bons quando confrontados com dados experimentais. Outro importante resultado do estudo foi a inferência de que pode haver uma relação entre a ordem da derivada e a estrutura física da turbulência, já que quando houve predominância da energia mecânica no fluxo turbulento todos os experimentos foram melhor descritos por $\alpha = 0.72$ e quando houve predominância da energia devida à convecção térmica, os dados experimentais foram melhor descritos por $\alpha = 0.80$. Moreira et al. (2019), por sua vez, apresentaram uma solução numérica para a equação da advecção-difusão tridimensional, com derivadas fracionárias de Caputo e com coeficientes de difusão lateral e vertical dependentes apenas da distância longitudinal em relação à fonte, e confrontaram seus resultados com dados do experimento de Copenhagen. No estudo, verificaram que o modelo com derivadas fracionárias apresentou melhores resultados do que o modelo com derivadas inteiras, algo que também foi verificado por Goulart; Lazo; Suarez (2020), mas utilizando a equação da advecção-difusão bidimensional com derivadas de Hausdorff, os quais obtiveram resultados melhores do que os obtidos utilizando o modelo clássico na simulação da dispersão de poluentes na atmosfera sob diferentes condições de estabilidade.

No contexto da aplicação do Cálculo Fracionário à dispersão de poluentes na atmosfera (Goulart et al., 2017; Tayebi; Shekari; Heydari, 2017; Moreira; Moret, 2018; Goulart; Lazo; Suarez, 2019; Moreira et al., 2019; Goulart; Lazo; Suarez, 2020), a Eq. 2.3 pode então ser

reescrita como

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial t^\alpha} + u \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} + v \frac{\partial^\alpha C}{\partial y^\alpha} + w \frac{\partial^\alpha C}{\partial z^\alpha} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial^\alpha C}{\partial y^\alpha} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C}{\partial z^\alpha} \right] + S \quad (2.4)$$

onde $\partial^\alpha/\partial t^\alpha$, $\partial^\alpha/\partial x^\alpha$, $\partial^\alpha/\partial y^\alpha$, $\partial^\alpha/\partial z^\alpha$ denotam as derivadas fracionárias, nesse caso, de ordem $0 < \alpha < 1$. Os coeficientes de difusão turbulenta, K_x , K_y e K_z , a depender da classe de estabilidade atmosférica, podem ser representados por diferentes expressões, como as sugeridas por Goulart et al. (2007), Degrazia; Campos Velho; Carvalho (1997) ou Seinfeld; Pandis (2006). É claro que, conforme o problema em estudo, algumas hipóteses simplificadoras podem ser consideradas, como no caso de tomarmos um sistema de referência onde o eixo x está alinhado com a direção do vento médio, de tal forma que $v = w = 0$, ou quando temos que o transporte longitudinal é dominado pela advecção, situação onde o primeiro termo do lado direito da Eq. 2.4 pode ser desprezado. Nesses casos, a Eq. 2.4 reduz-se a

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial t^\alpha} + u \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial^\alpha C}{\partial y^\alpha} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C}{\partial z^\alpha} \right] + S \quad (2.5)$$

Além disso, em problemas estacionários e naqueles onde o termo fonte não tem importância, o primeiro termo do lado esquerdo e o último do lado direito também podem ser suprimidos, de modo que a equação torna-se

$$u \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial^\alpha C}{\partial y^\alpha} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C}{\partial z^\alpha} \right] \quad (2.6)$$

Há diversas definições para as derivadas de ordens fracionárias e aqui apresentam-se algumas delas. As derivadas, à esquerda e à direita, de ordens arbitrárias no sentido de Grünwald-Letnikov, em um intervalo $[a, b]$ em que x é um ponto desse intervalo, são definidas respectivamente por (Samko; Kilbas; Marichev, 1993)

$$f_{a+}^{(\alpha)}(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Delta x^\alpha} \sum_{k=0}^{\frac{x-a}{\Delta x}} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x - k\Delta x), \quad (\alpha \in \mathbb{R}_+^*, x > a) \quad (2.7)$$

$$f_{b-}^{(\alpha)}(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Delta x^\alpha} \sum_{k=0}^{\frac{b-x}{\Delta x}} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x + k\Delta x), \quad (\alpha \in \mathbb{R}_+^*, x < b) \quad (2.8)$$

As derivadas fracionárias de Riemann-Liouville de uma função f no ponto x em $[a, b]$, à esquerda e à direita, por sua vez, são definidas respectivamente por (Samko; Kilbas; Marichev, 1993)

$${}_{RL}D_{a+}^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_a^x \frac{f(\xi)}{(x - \xi)^{\alpha - n + 1}} d\xi, \quad (n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+^*, x > a) \quad (2.9)$$

$${}_{RL}D_{b-}^\alpha f(x) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_x^b \frac{f(\xi)}{(\xi - x)^{\alpha - n + 1}} d\xi, \quad (n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+^*, x < b) \quad (2.10)$$

onde Γ denota a função Gamma e d^n/dx^n é uma derivada de ordem inteira n . Para uma grande classe de funções que aparecem em problemas físicos reais e em aplicações da engenharia, as definições de Riemann-Liouville e de Grünwald-Letnikov são equivalentes, o que permite a utilização da definição de Riemann-Liouville durante a formulação do problema e o emprego da definição de Grünwald-Letnikov na obtenção da solução numérica (Podlubny, 1999).

A derivada fracionária de Caputo de ordem α , à esquerda, por sua vez, é definida por

$${}^C D_{a+}^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x \frac{f^{(n)}(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha-n+1}} d\xi, \quad (n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+, x > a) \quad (2.11)$$

e à direita por

$${}^C D_{b-}^\alpha f(x) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \int_x^b \frac{f^{(n)}(\xi)}{(\xi-x)^{\alpha-n+1}} d\xi, \quad (n = [\alpha] + 1, \alpha \in \mathbb{R}_+, x < b) \quad (2.12)$$

onde $f^{(n)}(\xi) = \frac{d^n f(\xi)}{d\xi^n}$. Pode-se observar nas definições de Riemann-Liouville (Eqs. 2.9 - 2.10) e de Caputo (Eqs. 2.11 - 2.12) que a grande diferença entre elas está na ordem das operações de derivação e de integração. Essa simples alteração, no entanto, faz com que a derivada fracionária de Caputo de uma função constante seja zero, algo que não ocorre na definição de Riemann-Liouville. Além disso, as condições iniciais para as equações diferenciais fracionárias com derivadas de Caputo são de ordem inteira, o que possibilita a rigor uma melhor interpretação física (Podlubny, 1999).

Além dessas, ainda podem ser mencionadas outras formulações, como a derivada fracionária de Hilfer, que interpola as derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo, a de Weyl, a de Riesz, a de Marchaud, entre outras, cujas definições podem ser encontradas em Miller; Ross (1993); Samko; Kilbas; Marichev (1993); Podlubny (1999); Hilfer (2000); Yang; Liu; Turner (2010).

2.1 Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é apresentar uma nova modelagem, baseada na equação da advecção-difusão fracionária, e simular numericamente, em duas e em três dimensões, a dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária sob condições estáveis e instáveis, considerando diferentes definições para as derivadas de ordens fracionárias. Os objetivos específicos são:

- Discretizar a equação da advecção-difusão fracionária pelo Método das Diferenças Finitas.
- Validar os códigos unidimensional, bidimensional e tridimensional desenvolvidos em FORTRAN, resolvendo diferentes problemas com derivadas de ordens fracionárias.
- Analisar o desempenho das diferentes definições de derivadas fracionárias nos modelos de dispersão Eulerianos para estimar a dispersão de contaminantes na atmosfera.

- Comparar os resultados obtidos nas simulações com dados experimentais encontrados na literatura, à luz de critérios estatísticos bem definidos e recomendados pela comunidade científica da área da dispersão de poluentes na atmosfera.

3 DADOS UTILIZADOS PARA A VALIDAÇÃO DOS RESULTADOS

Para validar os resultados obtidos neste trabalho, utilizam-se dados experimentais frequentemente empregados em estudos de dispersão de poluentes na atmosfera. São eles: o experimento de Copenhagen (Gryning; Lyck, 1984; Gryning et al., 1987) que foi realizado sob condições atmosféricas instáveis; o experimento de Prairie-Grass (Barad, 1958) que foi realizado sob diversas condições de estabilidade; e o experimento de Hanford (Doran et al., 1984; Doran; Horst, 1985) que foi realizado sob condições atmosféricas estáveis.

3.1 Experimento de Copenhagen

O experimento de Copenhagen, descrito nos artigos de Gryning; Lyck (1984) e Gryning et al. (1987) foi realizado na região norte de Copenhagen, na Dinamarca, nos anos de 1978 e 1979 e se consistiu na liberação de hexafluoreto de enxofre (SF_6) em uma região principalmente residencial, com comprimento de rugosidade de 0,6 metros.

O gás foi liberado sem empuxo de uma altura de 115 metros e coletado ao nível do solo ao longo de três arcos perpendiculares ao vento médio onde as unidades de amostragem foram posicionadas às distâncias de 2 a 6 quilômetros do ponto onde o poluente foi liberado, como se pode observar na Fig. 3.1.

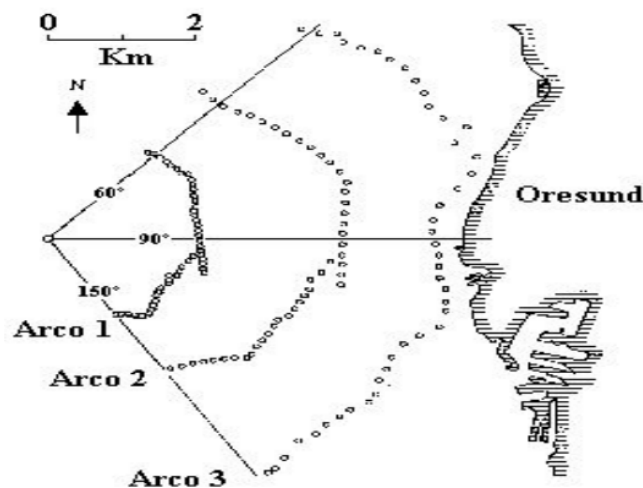


Figura 3.1: Experimento de Copenhagen (Gryning; Lyck, 1984).

Na Tab. 3.1 estão os dados micrometeorológicos e, em anexo, na Tab. 8.1 estão as concentrações integradas lateralmente (C^y) e as concentrações máximas, na linha central da pluma, (C_{max}) registradas no experimento de Copenhagen.

Tabela 3.1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen

Exp.	U_{10m} (m/s)	U_{115m} (m/s)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	$-L$ (m)	Q (g/s)
1	2,1	3,4	0,36	1,8	1980	37	3,2
2	4,9	10,6	0,73	1,8	1920	292	3,2
3	2,3	5,0	0,38	1,3	1120	71	3,2
4	2,5	4,6	0,38	0,7	390	133	2,3
5	3,1	6,7	0,45	0,7	820	444	3,2
6	7,2	13,2	1,05	2,0	1300	432	3,1
7	4,1	7,6	0,64	2,2	1850	104	2,4
8	4,2	9,4	0,69	2,2	810	56	3,0
9	5,1	10,5	0,75	1,9	2090	289	3,3

3.2 Experimento de Prairie-Grass

Em 1956, próximo à cidade de O'Neill, Nebraska, foi desenvolvido um amplo programa experimental de Micrometeorologia intitulado Projeto Prairie Grass. Originalmente descrito por Barad (1958), este experimento envolveu quatro universidades e duas agências governamentais norte-americanas, com o objetivo principal de determinar a taxa de difusão de um gás traçador (no caso, dióxido de enxofre – SO_2) como uma função das condições meteorológicas.

Em cada um dos 70 experimentos realizados, o traçador foi liberado continuamente durante 10 minutos (alcançando regime permanente) de uma fonte pontual (F na Fig. 3.2), localizada próxima à superfície terrestre (em $z \approx 0,5m$), em um terreno plano com comprimento de rugosidade aerodinâmica de apenas $6.10^{-3}m$, e coletado na altura de $1,5m$, em cerca de 540 pontos distribuídos sobre os arcos ilustrados na Fig. 3.2, onde os pontos A, B, C, D e E referem-se aos amostradores convenientemente alinhados com a direção do vento médio.

Sob ampla variedade de condições meteorológicas (velocidade do vento, cobertura de nuvens, estratificação térmica, etc.), dos 68 experimentos realizados, 34 foram no período diurno, quando o ar próximo ao solo está termicamente instável, e os demais, à noite, na presença de inversões de temperatura. Os parâmetros micrometeorológicos do experimento de Prairie-Grass sob condições instáveis e estáveis são apresentados, respetivamente, na Tab. 3.2 e na Tab. 3.3, onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, z_i é a altura da Camada Limite Planetária, w_* é a escala de velocidade vertical, U_{ref} é a velocidade do vento na altura de referência (neste caso, em $z = 8m$) e Q é a taxa de emissão de contaminante. As concentrações registradas nos experimentos estão em anexo, na Tab. 8.2, na Tab. 8.3 e na Tab. 8.4.

3.3 Experimento de Hanford

O experimento Hanford, descrito por Doran et al. (1984) e Doran; Horst (1985), foi realizado em 1983 nos Estados Unidos, sob condições atmosféricas estáveis. No experimento, os traçadores SF_6 (hexafluoreto de enxofre) e ZnS (sulfeto de zinco) foram lançados, simultaneamente, sem empuxo de uma altura de $2m$ a uma taxa média de liberação de $0,3g/s$. Ao todo

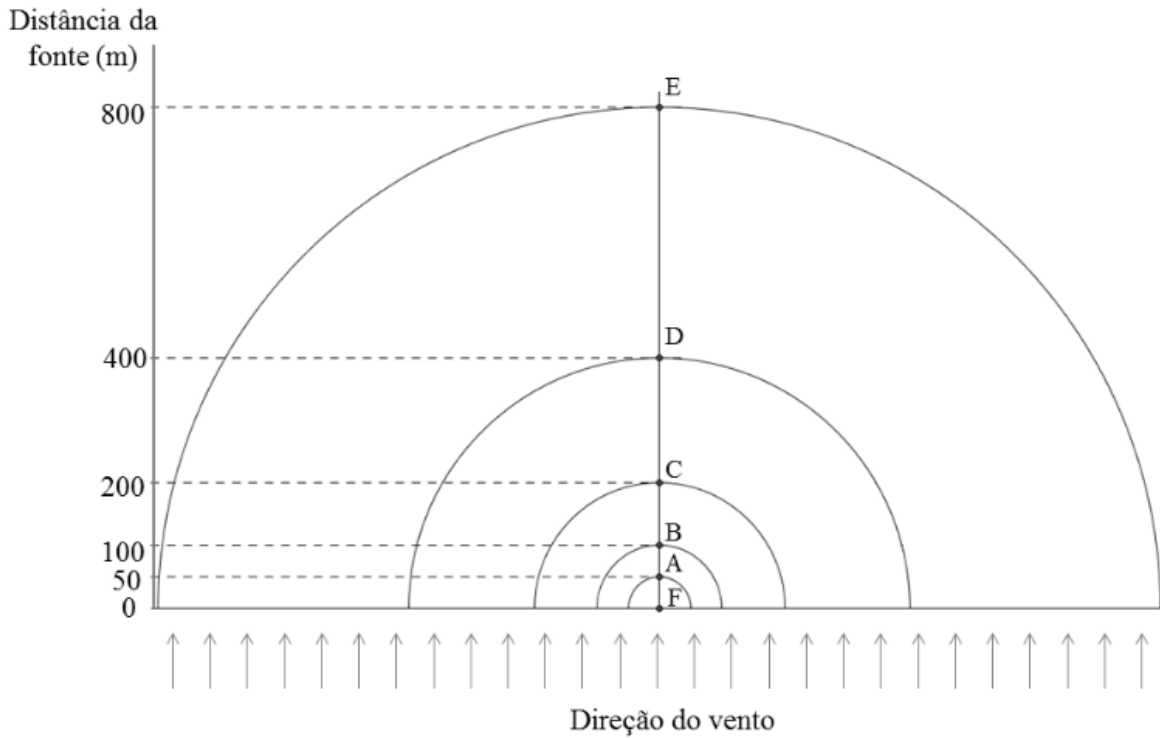


Figura 3.2: Experimento de Prairie-Grass (Barad, 1958).

Tabela 3.2: Parâmetros micrometeorológicos dos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis.

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

foram conduzidos 6 experimentos, em um terreno plano com comprimento de rugosidade de

Tabela 3.3: Parâmetros micrometeorológicos dos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas estáveis.

Exp.	L (m)	z_i (m)	u_* (m/s)	U_{10m} (m/s)	Q (g/s)
13	3,4	23	0,09	3,9	61,1
14	1,6	12	0,05	3,7	49,1
17	48	131	0,21	3,8	56,5
18	25	92	0,2	4	57,6
21	172	333	0,38	6,4	50,9
22	204	400	0,46	7,7	48,4
23	193	358	0,39	6,5	40,9
24	248	400	0,38	6,3	41,2
28	24	81	0,16	3,2	41,7
29	36	119	0,23	4,3	41,5
32	8,3	43	0,13	3,6	41,4
35	53	147	0,24	4,3	38,8
36	7,8	36	0,1	2,8	40
37	95	216	0,29	5	40,3
38	99	217	0,28	4,8	45,4
41	35	117	0,23	4,4	39,9
42	120	275	0,37	6,3	56,4
46	114	257	0,34	5,8	99,7
53	10	54	0,17	4,3	45,2
54	40	128	0,24	4,5	43,4
55	124	279	0,37	6,3	45,3
56	76	194	0,29	5,1	45,9
58	6,4	35	0,11	3,4	40,5
59	11	51	0,14	3,4	40,2
60	58	166	0,28	5	38,5

0,03m e com tempo médio de liberação em torno de 30min. As concentrações foram medidas por unidades de amostragem localizadas nas distâncias de 100m, 200m, 800m, 1600m e 3200m em relação à fonte. Os parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford podem ser vistos na Tab. 3.4 e as concentrações integradas lateralmente observadas no experimento podem ser encontradas, em anexo, na Tab. 8.5.

Tabela 3.4: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford.

Exp.	Data	L (m)	z_i (m)	u_* (m/s)	Q (g/s)	U_{2m} (m/s)
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

3.4 Índices Estatísticos

As validações das modelagens são feitas com base em dados experimentais e em outros resultados encontrados na literatura, utilizando os índices estatísticos definidos por Hanna (1989), os quais se constituem num procedimento padrão de análise recomendado pela comunidade científica da área da dispersão de poluentes na atmosfera. É com base nesses índices que os resultados obtidos são avaliados.

Considerem-se então que C_o e C_p sejam as concentrações observadas e preditas, respectivamente, e σ_o e σ_p seus respectivos desvios padrão. Os índices estatísticos utilizados foram os seguintes:

1. Erro quadrático médio normalizado (NMSE): definido por

$$\text{NMSE} = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}} \quad (3.1)$$

que fornece uma estimativa de quanto os valores preditos distinguem-se dos observados. Seu valor ótimo é zero e quanto mais o NMSE se aproxima deste valor, maior é a confiabilidade do modelo.

2. Fator de dois (FA2): Informa o percentual de dados normalizados contidos no intervalo

$$0.5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2 \quad (3.2)$$

que se refere à hipótese do valor predito estar entre a metade e o dobro do observado. O valor ideal dessa razão é 1, de forma que quanto maior for o percentual de dados dentro do FA2, maior é a confiabilidade do modelo.

3. Fator de Inclinação (FB): Exprime a tendência de o modelo subestimar ($\text{FB} > 0$) ou superestimar ($\text{FB} < 0$) os valores experimentais. É dado por

$$\text{FB} = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} \quad (3.3)$$

Seu melhor valor é zero.

4. Coeficiente de Correlação (CC): Exprime o grau de relação entre os dados, de modo que valores positivos indicam que os dados estão correlacionados e, negativos, que são inversamente relacionados. É dado por

$$\text{CC} = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p} \quad (3.4)$$

cujos valores ideais são 1.

5. Desvio fracional padrão (FS): Definido por

$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0.5(\sigma_o + \sigma_p)} \quad (3.5)$$

Seu melhor valor é zero e quanto mais próximo desse valor estiver o FS, melhor será o desempenho do modelo. $FS > 0$ indica que o desvio padrão das concentrações observacionais é maior do que o desvio padrão das concentrações preditas e $FS < 0$ indica que o desvio padrão das concentrações preditas é maior do que o desvio padrão das concentrações observacionais.

4 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DOS MODELOS

A simulação numérica da dispersão de poluentes na atmosfera apresentada no presente trabalho envolve a discretização da equação da advecção-difusão fracionária bidimensional e tridimensional com coeficientes variáveis e a implementação dos modelos discretos em FORTRAN visando as suas resoluções. Dada a complexidade da tarefa, entretanto, é interessante que se inicie a preparação do código computacional resolvendo problemas mais simples (unidimensionais). Por isso, nesta seção, em um primeiro momento, apresenta-se a evolução dos trabalhos no que se refere à preparação do código computacional, onde é tomado um modelo teórico, não realístico, mas com solução analítica conhecida, a fim de avaliar se o código computacional desenvolvido, quando aplicado a cada caso analisado, de fato fornece resultados condizentes com o problema considerado. Após esses resultados iniciais, são apresentadas as discretizações dos modelos bidimensionais e tridimensionais empregados nas simulações da dispersão de poluentes na atmosfera.

4.1 Problema estacionário de advecção-difusão unidimensional

Considera-se, nesse caso, a equação

$$u \frac{d^\alpha C}{dx^\alpha} = \frac{d}{dx} \left[K \frac{d^\alpha C}{dx^\alpha} \right] \quad (4.1)$$

no domínio $0 \leq x \leq L_x$, $C = C(x)$, u é constante, $K = K(x)$, $0 < \alpha < 1$, $C(0) = C_0$, $C(L_x) = C_L$.

As derivadas fracionárias no modelo são estabelecidas conforme a definição de Caputo, à esquerda, aproximadas com o emprego da discretização L1 (Lin; Xu, 2007; Guo; Pu; Huang, 2015; Jin; Lazarov; Zhou, 2019), segundo a qual

$$\frac{\partial^\alpha C(x_i)}{\partial x^\alpha} \approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{p=0}^{i-1} b_p^\alpha \frac{[C(x_{i-p}) - C(x_{i-p-1})]}{(\Delta x_{i-p-1})^\alpha} \quad (4.2)$$

em que para $\Delta x = h$, tem-se o erro de truncamento da ordem $h^{2-\alpha}$. Os coeficientes b_p são calculados por $b_p^\alpha = (p+1)^{1-\alpha} - p^{1-\alpha}$, $p = 1, 2, \dots, i-1$ e $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, para $i = 0, 1, 2, \dots$.

4.1.1 Discretização

Inicialmente, toma-se a malha apresentada na Fig. 4.1, cujo espaçamento é não uniforme, definido por

$$x_i = \frac{\arctan\left(-\beta + \frac{i\beta}{L}\right) + \arctan(\beta)}{\arctan(\beta)} L_x \quad (4.3)$$

em que $i = 0, 1, \dots, L$ e β é a taxa de refinamento (quanto maior o valor de β , maior é o refinamento próximo a $x_0 = 0$).

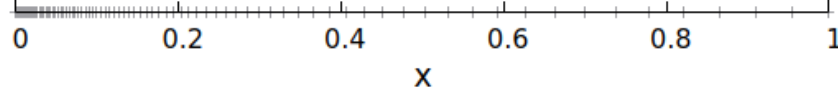


Figura 4.1: Ilustração da malha unidimensional.

Diante disso, pode-se aproximar as derivadas da Eq. 4.1 de tal modo que

$$u(x_i) \frac{d^\alpha C(x_i)}{dx^\alpha} = \frac{dK(x_i)}{dx} \frac{d^\alpha C(x_i)}{dx^\alpha} + \frac{K(x_i)}{\Delta x_i} \frac{d^\alpha C(x_{i+1})}{dx^\alpha} - \frac{K(x_i)}{\Delta x_i} \frac{d^\alpha C(x_i)}{dx^\alpha} \quad (4.4)$$

Reorganizando os termos e aproximando a derivada de ordem inteira, obtém-se

$$\left[u(x_i) - \frac{K(x_{i+1}) - K(x_{i-1})}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i} + \frac{K(x_i)}{\Delta x_i} \right] \frac{d^\alpha C(x_i)}{dx^\alpha} + \left[-\frac{K(x_i)}{\Delta x_i} \right] \frac{d^\alpha C(x_{i+1})}{dx^\alpha} = 0 \quad (4.5)$$

Substituindo a Eq. 4.2 na Eq. 4.5 e definindo

$$A_1 = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \left[u(x_i) - \frac{K(x_{i+1}) - K(x_{i-1})}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i} + \frac{K(x_i)}{\Delta x_i} \right] \quad (4.6)$$

$$A_2 = \frac{-1}{\Gamma(2-\alpha)} \left[\frac{K(x_i)}{\Delta x_i} \right] \quad (4.7)$$

obtém-se

$$\begin{aligned} A_1 \left[b_0^\alpha \frac{C(x_i) - C(x_{i-1})}{(\Delta x_{i-1})^\alpha} + b_1^\alpha \frac{C(x_{i-1}) - C(x_{i-2})}{(\Delta x_{i-2})^\alpha} + \dots + b_{i-1}^\alpha \frac{C(x_1) - C(x_0)}{(\Delta x_0)^\alpha} \right] + \\ A_2 \left[b_0^\alpha \frac{C(x_{i+1}) - C(x_i)}{(\Delta x_i)^\alpha} + b_1^\alpha \frac{C(x_i) - C(x_{i-1})}{(\Delta x_{i-1})^\alpha} + \dots + b_i^\alpha \frac{C(x_1) - C(x_0)}{(\Delta x_0)^\alpha} \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

Assim chega-se ao sistema

$$\begin{aligned} & \left(-A_1 \frac{b_{i-1}^\alpha}{(\Delta x_0)^\alpha} - A_2 \frac{b_i^\alpha}{(\Delta x_0)^\alpha} \right) C(x_0) + \\ & \left(A_1 \frac{b_{i-1}^\alpha}{(\Delta x_0)^\alpha} - A_1 \frac{b_{i-2}^\alpha}{(\Delta x_1)^\alpha} + A_2 \frac{b_i^\alpha}{(\Delta x_0)^\alpha} - A_2 \frac{b_{i-1}^\alpha}{(\Delta x_1)^\alpha} \right) C(x_1) + \dots + \\ & \left(A_1 \frac{b_1^\alpha}{(\Delta x_{i-2})^\alpha} - A_1 \frac{b_0^\alpha}{(\Delta x_{i-1})^\alpha} + A_2 \frac{b_2^\alpha}{(\Delta x_{i-2})^\alpha} - A_2 \frac{b_1^\alpha}{(\Delta x_{i-1})^\alpha} \right) C(x_{i-1}) + \\ & \left(A_1 \frac{b_0^\alpha}{(\Delta x_{i-1})^\alpha} - A_2 \frac{b_1^\alpha}{(\Delta x_{i-1})^\alpha} - A_2 \frac{b_0^\alpha}{(\Delta x_i)^\alpha} \right) C(x_i) + \left(A_2 \frac{b_0^\alpha}{(\Delta x_i)^\alpha} \right) C(x_{i+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

para $i = 1, 2, \dots, L-1$, onde $C(x_0) = C_0$ e $C(x_{N_x}) = C_L$.

4.1.2 Resultados

Para validar o código, foi considerado inicialmente o caso da equação da advecção-difusão unidimensional clássica, com derivadas de ordens inteiras, no domínio $[0, 1]$ cuja solução analítica é conhecida. Como condições de contorno, foram empregadas $C(0) = 10$ e $C(1) = 0$. Nas simulações, tomou-se u constante e $\alpha = 0,999$, esperando que os resultados numéricos obtidos fossem muito próximos dos analíticos, para $\alpha = 1$. Em todas as simulações o coeficiente de difusão foi $K(x) = -x + 2$. Na Fig. 4.2 os resultados numéricos obtidos para a situação descrita são confrontados com os analíticos.

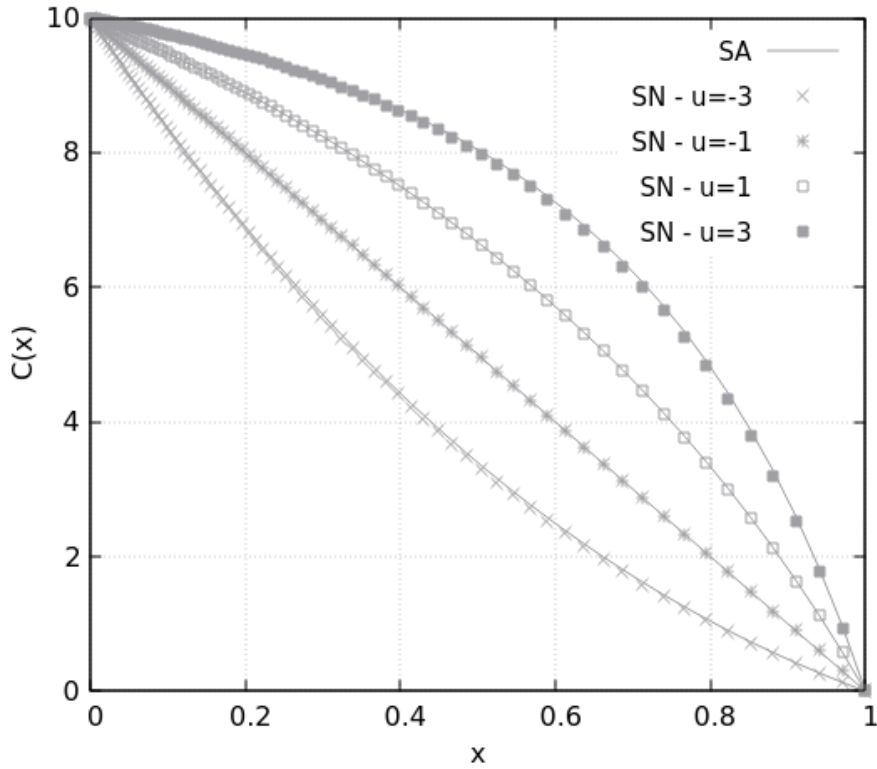


Figura 4.2: SN: Solução Numérica para $\alpha = 0.999$; SA: Solução Analítica para $\alpha = 1$.

Como se pode observar na Fig. 4.2, os resultados analíticos e numéricos estão em muito boa concordância, de modo que se pode afirmar que a modelagem fracionária (numérica) para $\alpha = 0,999$ forneceu resultados extremamente satisfatórios quando comparada com a modelagem clássica (analítica), em que $\alpha = 1$, o que valida o código, uma vez que de fato espera-se que quanto mais próximos de 1 forem os valores de α , mais próximas da solução analítica para $\alpha = 1$ sejam os resultados obtidos. A solução analítica da Eq. 4.1 para $C(0) = 10$, $C(1) = 0$, $\alpha = 1$, $K(x) = -x + 2$ e $u \neq 0$, constante, em $[0, 1]$, é dada por

$$C(x) = \frac{10 \cdot 2^u}{2^u - 1} \left[1 - \frac{1}{(2-x)^u} \right] \quad (4.10)$$

Quando se tem valores menores de α , como se pode observar na Fig. 4.3, há alterações gradativas nos perfis de C , onde constata-se que os valores de C ao longo do domínio tornam-se menores quando a ordem da derivada é menor.

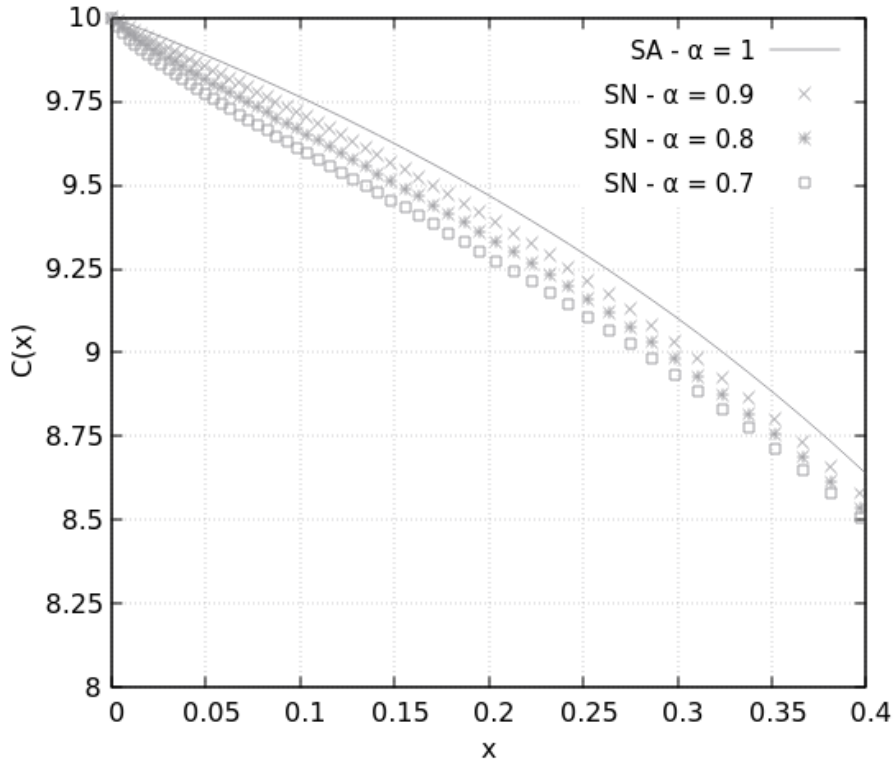


Figura 4.3: Resultados numéricos para $u = 3$ e diferentes valores de α .

Outro item analisado neste problema foi o erro absoluto máximo entre as soluções obtidas utilizando-se a malha com espaçamento não uniforme dada pela Eq. 4.3 e uma malha com espaçamento uniforme. A Fig. 4.4 apresenta essa comparação. Nela, pode-se observar que, para as mesmas quantidades de pontos, a malha com espaçamento não uniforme fornece resultados mais próximos dos analíticos do que a malha com espaçamento uniforme, algo que faz sentido, uma vez que a malha não uniforme é mais refinada em uma região crucial do domínio, próxima ao contorno $x = 0$, onde estão os maiores gradientes.

4.2 Malhas para as simulações da dispersão de poluentes na atmosfera

As malhas empregadas em todas as simulações da dispersão de poluentes na atmosfera, do mesmo modo que no problema unidimensional considerado no tópico anterior, são não uniformes. Na Fig. 4.5 podem ser observados os refinamentos empregados na malha tridimensional. Para facilitar a visualização, na ilustração é considerado o domínio $[0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ com $L_x = L_y = L_z = 10$ em todas as direções, com pontos $(x_0, x_1, \dots, x_i, \dots, x_L)$ na direção longitudinal, $(y_0, y_1, \dots, y_j, \dots, y_M)$ na direção transversal e $(z_0, z_1, \dots, z_k, \dots, z_N)$ na direção vertical e $L = M = N = 30$. A escolha dos locais onde a malha é mais refinada deve-se ao fato de que os maiores gradientes estão nas regiões próximas à fonte (em torno de $x = 0$, de $y = 0, 5L_y$ e de $z = 0$), de modo que, com mais pontos nesses locais, via de regra, podem-se obter resultados mais precisos. Os pontos F na Fig. 4.5 ilustram a região onde a fonte está localizada.

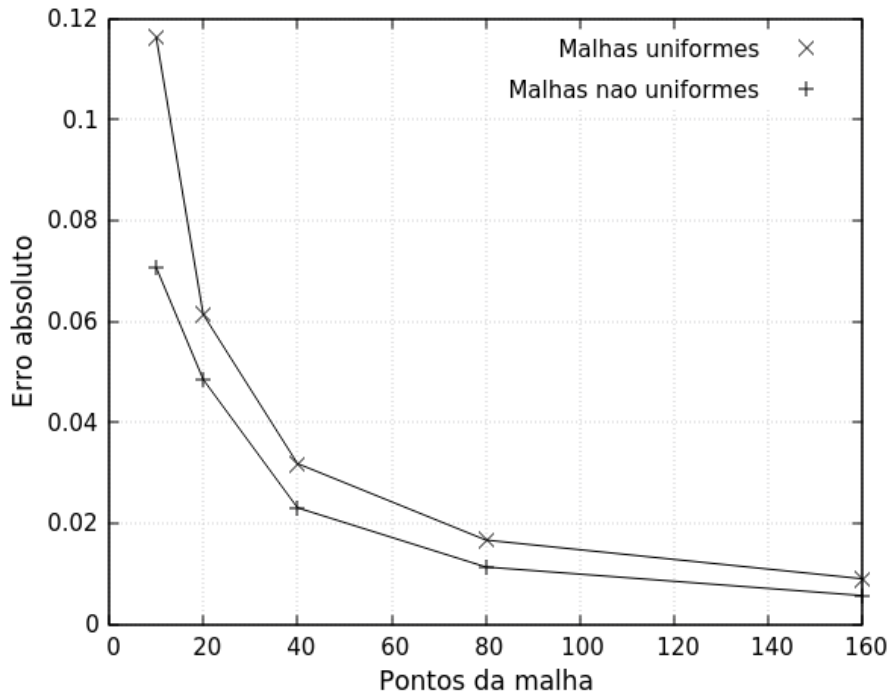


Figura 4.4: Comparação dos erros absolutos máximos entre as soluções numéricas e as soluções analíticas para diferentes tipos de malha.

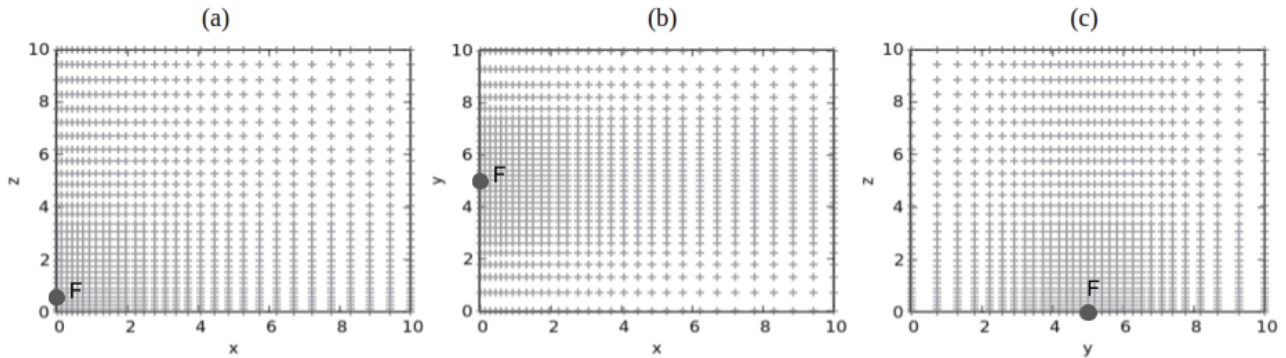


Figura 4.5: Refinamentos da malha: (a) Plano xz ; (b) Plano xy ; (c) Plano yz .

4.3 Condições de contorno

As condições de contorno dos problemas bidimensionais são

$$uC(x, z) = Q\delta(z - H_s), \quad \text{em} \quad x = 0 \quad (4.11)$$

$$K_z \frac{\partial^\alpha C(x, z)}{\partial z^\alpha} = 0, \quad \text{em} \quad z = 0 \quad \text{e} \quad z = z_i \quad (4.12)$$

onde Q é a intensidade da fonte (g/s), z_i é a altura da CLP (m), H_s é a altura da fonte (m) e $\delta(\cdot)$ é a função Delta de Dirac.

As condições de contorno do problema tridimensional, por sua vez, são

$$uC(x, y, z) = Q\delta(z - H_s)\delta(y - L_s), \quad \text{em} \quad x = 0 \quad (4.13)$$

$$K_z \frac{\partial^\alpha C(x, y, z)}{\partial z^\alpha} = 0, \quad \text{em} \quad z = 0 \quad \text{e} \quad z = z_i \quad (4.14)$$

$$K_y \frac{\partial^\alpha C(x, y, z)}{\partial y^\alpha} = 0, \quad \text{em} \quad y = 0 \quad \text{e} \quad y = y_i \quad (4.15)$$

onde y_i (m) indica a dimensão do domínio em relação ao eixo y , a qual, neste trabalho, foi definida como o dobro da dimensão do domínio em relação ao eixo x . Ou seja, no experimento de Prairie-Grass, por exemplo, o domínio em x é $[0, 800]$, então o domínio definido para y é $[0, 1600]$. L_s , por sua vez, indica a posição da fonte na direção transversal, estabelecida como $0,5y_i$.

4.4 Coeficientes de difusão e perfil de velocidade

Neste trabalho, o perfil de velocidade do vento é definido pela lei de potência (Demarrais, 1959)

$$U_z = U_{ref} \left(\frac{z}{z_{ref}} \right)^\gamma \quad (4.16)$$

onde U_z representa a velocidade do vento em função da altura z , U_{ref} é a velocidade do vento medida na altura de referência z_{ref} e γ é um parâmetro relacionado à intensidade da turbulência e à rugosidade aerodinâmica do solo (Ayer, 1960).

O coeficiente de difusão vertical (K_z), empregado nas simulações dos experimentos realizados sob condições atmosféricas instáveis, é (Degrazia; Campos Velho; Carvalho, 1997)

$$K_z = 0,22w_*z_i \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} (1 - e^{-4z/z_i} - 0,0003e^{8z/z_i}) \quad (4.17)$$

onde w_* é a escala de velocidade vertical e z_i representa a altura da Camada Limite Planetária (CLP) ou, nesse caso, da Camada Limite Convectiva (CLC).

Para condições estáveis, por outro lado, o coeficiente de difusão vertical (K_z) é dado por (Mangia et al., 2001)

$$K_z = \frac{0,3(1 - z/z_i)u_*z}{1 + 3,7z/\Lambda} \quad (4.18)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, $\Lambda = L(1 - z/z_i)^{5/4}$ e z_i representa a altura da CLP ou, nesse caso, da Camada Limite Estável (CLE).

O coeficiente de difusão lateral, para condições atmosféricas estáveis, por sua vez, é definido como (Degrazia; Vilhena; Moraes, 1996)

$$K_y = \frac{2\sqrt{\pi} 0,64 u_* z_i a_v^2 (A_1)^{3/2} X^* A_2 [2\sqrt{\pi} 0,64 a_v^2 A_2 + 8a_v (f_m)_v (A_1)^{3/4} X^*]}{[2\sqrt{\pi} 0,64 A_2 + 16a_v (f_m)_v (A_1)^{3/4} X^*]^2} \quad (4.19)$$

com

$$A_1 = (1 - z/z_i) \quad (4.20)$$

$$A_2 = (z/z_i) \quad (4.21)$$

$$a_v = (2,7 c_v)^{1/2} / (f_m)_{n,v}^{1/3} \quad (4.22)$$

$$(f_m)_v = (f_m)_{n,v} \left(1 + 3,7 \frac{z}{\Lambda}\right) \quad (4.23)$$

$$X^* = x u_* / (u z_i) \quad (4.24)$$

$$\Lambda = L(A_1)^{5/4} \quad (4.25)$$

onde $(f_m)_{n,v} = 0,16$ e $c_v = 0,4$ são constantes.

Finalmente, para as simulações dos experimentos realizados sob condições atmosféricas instáveis, tem-se o coeficiente de difusão lateral dado por (Degrazia; Campos Velho; Carvalho, 1997)

$$K_y = \frac{\sqrt{\pi} \sigma_v z}{16 (f_m)_v q_v} \quad (4.26)$$

com

$$\sigma_v^2 = \frac{0,98 c_v}{(f_m)_v^{2/3}} \left(\frac{\Psi_\epsilon}{q_v}\right)^{2/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2 \quad (4.27)$$

$$q_v = 4,16 \frac{z}{z_i} \quad (4.28)$$

$$\Psi_\epsilon^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 \left(-\frac{z}{L}\right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2} \quad (4.29)$$

$$(f_m)_v = 0,16 \quad (4.30)$$

onde σ_v é o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal, q_v é a função estabilidade, Ψ_ϵ é a função da taxa de dissipação molecular adimensional, c_v é constante e $(f_m)_v$ é o pico de onda lateral.

4.5 Discretização das equações para simular a dispersão de poluentes na atmosfera

Neste trabalho, são considerados diferentes modelos, bidimensionais e tridimensionais, com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville e de Caputo, de três formas: com derivada fracionária somente no termo advectivo; com derivada fracionária somente no termo difusivo; e com derivadas fracionárias em todos os termos. Esses modelos são discretizados pelo Método das Diferenças Finitas (MDF) e as derivadas fracionárias são aproximadas por uma técnica já testada e validada por especialistas da área (Lin; Xu, 2007; Guo; Pu; Huang, 2015; Jin; Lazarov; Zhou, 2019).

4.5.1 Fórmulas para aproximar numericamente as derivadas fracionárias

As derivadas fracionárias de Caputo, à esquerda, nos modelos bidimensionais e tridimensionais de dispersão de poluentes, são estabelecidas com o emprego da discretização L1 (Lin; Xu, 2007; Guo; Pu; Huang, 2015; Jin; Lazarov; Zhou, 2019), segundo a qual

$$\frac{\partial^\alpha C(x_i, z_k)}{\partial x^\alpha} \approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{p=0}^{i-1} b_p^\alpha \frac{[C(x_{i-p}, z_k) - C(x_{i-p-1}, z_k)]}{(\Delta x_{i-p-1})^\alpha} \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial^\alpha C(x_i, z_k)}{\partial z^\alpha} \approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{p=0}^{k-1} b_p^\alpha \frac{[C(x_i, z_{k-p}) - C(x_i, z_{k-p-1})]}{(\Delta z_{k-p-1})^\alpha} \quad (4.32)$$

$$\frac{\partial^\alpha C(x_i, y_j, z_k)}{\partial x^\alpha} \approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{p=0}^{i-1} b_p^\alpha \frac{[C(x_{i-p}, y_j, z_k) - C(x_{i-p-1}, y_j, z_k)]}{(\Delta x_{i-p-1})^\alpha} \quad (4.33)$$

$$\frac{\partial^\alpha C(x_i, y_j, z_k)}{\partial y^\alpha} \approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{p=0}^{j-1} b_p^\alpha \frac{[C(x_i, y_{j-p}, z_k) - C(x_i, y_{j-p-1}, z_k)]}{(\Delta y_{j-p-1})^\alpha} \quad (4.34)$$

$$\frac{\partial^\alpha C(x_i, y_j, z_k)}{\partial z^\alpha} \approx \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{p=0}^{k-1} b_p^\alpha \frac{[C(x_i, y_j, z_{k-p}) - C(x_i, y_j, z_{k-p-1})]}{(\Delta z_{k-p-1})^\alpha} \quad (4.35)$$

onde $b_p^\alpha = (p+1)^{1-\alpha} - p^{1-\alpha}$, $p = 1, 2, \dots, i-1$, $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, para $i = 0, 1, 2, \dots$, $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$, para $j = 0, 1, 2, \dots$ e $\Delta z_k = z_{k+1} - z_k$, para $k = 0, 1, 2, \dots$. O esquema de discretização L1 também é utilizado para aproximar as derivadas de Riemann-Liouville por meio da relação entre as derivadas fracionárias de Caputo e de Riemann-Liouville dada por Kilbas; Srivastava; Trujillo (2006)

$${}^C D_{a+}^\alpha f(x) = {}_{RL} D_{a+}^\alpha f(x) - \sum_{p=0}^{m-1} \frac{f^{(p)}(a)}{\Gamma(p-\alpha+1)} (x-a)^{p-\alpha} \quad (4.36)$$

onde $m-1 < \alpha \leq m$, com $m \in \mathbb{N}$.

As fórmulas da discretização L1 para as derivadas de Caputo, combinadas com a relação dada pela Eq. 4.36, também fornecem aproximações às derivadas de Riemann-Liouville.

4.5.2 Modelo 2D com derivadas fracionárias de Caputo no termo advectivo

Para a obtenção do modelo bidimensional, a equação da advecção-difusão tridimensional (Eq. 2.6) pode ser integrada transversalmente à direção do vento. Nessas situações, e considerando-se a derivada fracionária apenas no termo advectivo, a Eq. 2.6 pode então ser reescrita como

$$u \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial C^y}{\partial z} \right] \quad (4.37)$$

onde $C^y = C^y(x, z)$ representa a concentração média de poluente integrada lateralmente.

Considerando a malha com pontos x_i na direção longitudinal e z_k na direção vertical, pelo Método das Diferenças Finitas, as derivadas inteiras da Eq. 4.37 podem ser aproximadas de modo a obter-se

$$A_x \left(\frac{\partial^\alpha C^y}{\partial x^\alpha} \right)_{x_i} + A_z \left(\frac{\partial C^y}{\partial z} \right)_{z_k} + B_z \left(\frac{\partial C^y}{\partial z} \right)_{z_{k+1}} = 0 \quad (4.38)$$

com

$$A_x = (u)_{x_i} \quad (4.39)$$

$$A_z = \frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \quad (4.40)$$

$$B_z = \frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \quad (4.41)$$

onde $\Delta z_k = z_k - z_{k-1}$, para $k = 0, 1, \dots, N-1$.

Aproximando as derivadas inteiras da Eq. 4.38 de modo que

$$\left(\frac{\partial C^y}{\partial z} \right)_{z_k} = \frac{(C^y)_{z_k} - (C^y)_{z_{k-1}}}{\Delta z_k} \quad (4.42)$$

$$\left(\frac{\partial C^y}{\partial z} \right)_{z_{k+1}} = \frac{(C^y)_{z_{k+1}} - (C^y)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \quad (4.43)$$

e, substituindo a Eq. 4.31 na Eq. 4.38, chega-se ao sistema

$$\begin{aligned} & [-G_1 b_{i-1}^\alpha] C^y(x_0, z_k) + [-G_1 (b_{i-1}^\alpha - b_{i-2}^\alpha)] C^y(x_1, z_k) + \\ & [-G_1 (b_{i-2}^\alpha - b_{i-3}^\alpha)] C^y(x_2, z_k) + \dots + [-G_1 (b_1^\alpha - b_0^\alpha)] C^y(x_{i-1}, z_k) + \\ & [G_1 b_0^\alpha + G_2 - G_3] C^y(x_i, z_k) + [-G_2] C^y(x_i, z_{k-1}) + [G_3] C^y(x_i, z_{k+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.44)$$

para $i = 1, 2, \dots, L$ e $k = 1, 2, \dots, N-1$, onde

$$G_1 = \frac{(u)_{x_i}}{\Delta x_{i-1}^\alpha \Gamma(2-\alpha)} \quad (4.45)$$

$$G_2 = \frac{1}{\Delta z_{k-1}} \left[\frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \right] \quad (4.46)$$

$$G_3 = \frac{1}{\Delta z_k} \left[\frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \right] \quad (4.47)$$

Para completar o sistema dado pela Eq. 4.44, tem-se ainda as equações para os contornos, dadas por

$$\left(-\frac{1}{\Delta z_0} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{1}{\Delta z_0} \right) C(x_i, z_1) = 0 \quad (4.48)$$

$$\left(-\frac{1}{\Delta z_{N-1}} \right) C(x_i, z_{N-1}) + \left(\frac{1}{\Delta z_{N-1}} \right) C(x_i, z_N) = 0 \quad (4.49)$$

$$C(x_0, z_k) = \frac{Q}{u(x_0, z_k)} \delta(z_k - H_s) \quad (4.50)$$

onde a função Delta de Dirac é aproximada por (Bojovic; Jovanovic, 2006)

$$\delta(z_k - H_s) = \begin{cases} 0 & , \text{ se } z_k \neq H_s \\ \frac{1}{\Delta z_k} & , \text{ se } z_k = H_s \end{cases} \quad (4.51)$$

4.5.3 Modelo 2D com derivadas fracionárias de Caputo no termo difusivo

A equação da advecção-difusão bidimensional com derivada fracionária no termo difusivo é dada por

$$u \frac{\partial C^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial z^\alpha} \right] \quad (4.52)$$

Com um procedimento análogo ao apresentado na seção 4.5.2, pode-se discretizar a Eq. 4.52, de modo a obter-se o sistema

$$\begin{aligned} & [-G_1] C^y(x_{i-1}, z_k) + [-G_2 b_{k-1}^\alpha - G_3 b_k^\alpha] C^y(x_i, z_0) + \\ & [G_2(b_{k-1}^\alpha - b_{k-2}^\alpha) + G_3(b_k^\alpha - b_{k-1}^\alpha)] C^y(x_i, z_1) + \\ & [G_2(b_{k-2}^\alpha - b_{k-3}^\alpha) + G_3(b_{k-1}^\alpha - b_{k-2}^\alpha)] C^y(x_i, z_2) + \dots + \\ & [G_2(b_1^\alpha - b_0^\alpha) + G_3(b_2^\alpha - b_1^\alpha)] C^y(x_i, z_{k-1}) + \\ & [G_1 + G_2 b_0^\alpha + G_3(b_1^\alpha - b_0^\alpha)] C^y(x_i, z_k) + [G_3 b_0^\alpha] C^y(x_i, z_{k+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.53)$$

para $i = 1, 2, \dots, L$ e $k = 1, 2, \dots, N - 1$, onde

$$G_1 = \frac{(u)_{x_i}}{\Delta x_{i-1}} \quad (4.54)$$

$$G_2 = \frac{1}{\Delta z_{k-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \right] \quad (4.55)$$

$$G_3 = \frac{1}{\Delta z_k^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \right] \quad (4.56)$$

Para completar o sistema dado pela Eq. 4.53, tem-se ainda as equações para os contornos, dadas por

$$\left(-\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) = 0 \quad (4.57)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_{N-2}^\alpha}{\Delta z_1^\alpha} - \frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) + \dots + \\ & \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} - \frac{b_1^\alpha}{\Delta z_{N-2}^\alpha} \right) C(x_i, z_{N-1}) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} \right) C(x_i, z_N) = 0 \end{aligned} \quad (4.58)$$

$$C(x_0, z_k) = \frac{Q}{u(x_0, z_k)} \delta(z_k - H_s) \quad (4.59)$$

onde a função Delta de Dirac é aproximada pela Eq. 4.51.

4.5.4 Modelo 2D com derivadas fracionárias de Caputo nos termos advectivo e difusivo

A equação da advecção-difusão bidimensional com derivadas fracionárias nos termos advectivo e difusivo é dada por

$$u \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial z^\alpha} \right] \quad (4.60)$$

Novamente, com um procedimento similar ao apresentado na seção 4.5.2, pode-se discretizar a Eq. 4.60, chegando-se ao sistema

$$\begin{aligned} & [-G_1 b_{i-1}^\alpha] C^y(x_0, z_k) + [G_1 (b_{i-1}^\alpha - b_{i-2}^\alpha)] C^y(x_1, z_k) + \\ & [G_1 (b_{i-2}^\alpha - b_{i-3}^\alpha)] C^y(x_2, z_k) + \dots + [G_1 (b_1^\alpha - b_0^\alpha)] C^y(x_{i-1}, z_k) + \\ & [(G_1 + G_2 - G_3) b_0^\alpha + G_3 b_1^\alpha] C^y(x_i, z_k) + [G_2 b_{k-1}^\alpha - G_3 b_k^\alpha] C^y(x_i, z_0) + \\ & [G_2 (b_{k-1}^\alpha - b_{k-2}^\alpha) + G_3 (b_k^\alpha - b_{k-1}^\alpha)] C^y(x_i, z_1) + \dots + \\ & [G_2 (b_1^\alpha - b_0^\alpha) + G_3 (b_2^\alpha - b_1^\alpha)] C^y(x_i, z_{k-1}) + [G_3 b_0^\alpha] C^y(x_i, z_{k+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.61)$$

para $i = 1, 2, \dots, L$ e $k = 1, 2, \dots, N - 1$, onde nesse caso os parâmetros G_1 , G_2 e G_3 são dados por

$$G_1 = \frac{(u)_{x_i}}{\Delta x_{i-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \quad (4.62)$$

$$G_2 = \frac{1}{\Delta z_{k-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \right] \quad (4.63)$$

$$G_3 = \frac{1}{\Delta z_k^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \right] \quad (4.64)$$

Para completar o sistema dado pela Eq. 4.61, tem-se ainda as equações para os contornos, dadas por

$$\left(-\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) = 0 \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_{N-2}^\alpha}{\Delta z_1^\alpha} - \frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) + \dots + \\ & \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} - \frac{b_1^\alpha}{\Delta z_{N-2}^\alpha} \right) C(x_i, z_{N-1}) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} \right) C(x_i, z_N) = 0 \end{aligned} \quad (4.66)$$

$$C(x_0, z_k) = \frac{Q}{u(x_0, z_k)} \delta(z_k - H_s) \quad (4.67)$$

onde a função Delta de Dirac é aproximada pela Eq. 4.51.

4.5.5 Modelo 2D com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville no termo advectivo

A equação da advecção-difusão bidimensional com derivada fracionária no termo advectivo é dada pela Eq. 4.37, aqui reescrita

$$u \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial C^y}{\partial z} \right]$$

De forma semelhante à apresentada na seção 4.5.2, e com base na relação entre as derivadas de Caputo e de Riemann-Liouville dada pela Eq. 4.36, pode-se discretizar a Eq. 4.37, de modo a obter-se o sistema

$$\begin{aligned} & \left[-G_1 b_{i-1}^\alpha + \frac{1}{x_i^\alpha \Gamma(1 - \alpha)} \right] C^y(x_0, z_k) + [-G_1 (b_{i-1}^\alpha - b_{i-2}^\alpha)] C^y(x_1, z_k) + \\ & [-G_1 (b_{i-2}^\alpha - b_{i-3}^\alpha)] C^y(x_2, z_k) + \dots + [-G_1 (b_1^\alpha - b_0^\alpha)] C^y(x_{i-1}, z_k) + \\ & [G_1 b_0^\alpha + G_2 - G_3] C^y(x_i, z_k) + [-G_2] C^y(x_i, z_{k-1}) + [G_3] C^y(x_i, z_{k+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.68)$$

para $i = 1, 2, \dots, L$ e $k = 1, 2, \dots, N - 1$, onde

$$G_1 = \frac{(u)_{x_i}}{\Delta x_{i-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \quad (4.69)$$

$$G_2 = \frac{1}{\Delta z_{k-1}} \left[\frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \right] \quad (4.70)$$

$$G_3 = \frac{1}{\Delta z_k} \left[\frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \right] \quad (4.71)$$

Para completar o sistema dado pela Eq. 4.68, tem-se ainda as equações para os contornos, dadas por

$$\left(-\frac{1}{\Delta z_0} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{1}{\Delta z_0} \right) C(x_i, z_1) = 0 \quad (4.72)$$

$$\left(-\frac{1}{\Delta z_{N-1}} \right) C(x_i, z_{N-1}) + \left(\frac{1}{\Delta z_{N-1}} \right) C(x_i, z_N) = 0 \quad (4.73)$$

$$C(x_0, z_k) = \frac{Q}{u(x_0, z_k)} \delta(z_k - H_s) \quad (4.74)$$

onde a função Delta de Dirac é aproximada pela Eq. 4.51.

4.5.6 Modelo 2D com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville no termo difusivo

A equação da advecção-difusão bidimensional com derivada fracionária no termo difusivo é dada pela Eq. 4.52

$$u \frac{\partial C^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial z^\alpha} \right]$$

Empregando o mesmo procedimento utilizado na discretização apresentada na seção 4.5.2, juntamente com a relação dada pela Eq. 4.36, pode-se discretizar a Eq. 4.52, obtendo-se o sistema

$$\begin{aligned} [-G_1] C^y(x_{i-1}, z_k) + \left[-G_2 b_{k-1}^\alpha - G_3 b_k^\alpha + \frac{1}{z_k^\alpha \Gamma(1-\alpha)} \right] C^y(x_i, z_0) + \\ [G_2(b_{k-1}^\alpha - b_{k-2}^\alpha) + G_3(b_k^\alpha - b_{k-1}^\alpha)] C^y(x_i, z_1) + \\ [G_2(b_{k-2}^\alpha - b_{k-3}^\alpha) + G_3(b_{k-1}^\alpha - b_{k-2}^\alpha)] C^y(x_i, z_2) + \dots + \\ [G_2(b_1^\alpha - b_0^\alpha) + G_3(b_2^\alpha - b_1^\alpha)] C^y(x_i, z_{k-1}) + \\ [G_1 + G_2 b_0^\alpha + G_3(b_1^\alpha - b_0^\alpha)] C^y(x_i, z_k) + [G_3 b_0^\alpha] C^y(x_i, z_{k+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.75)$$

para $i = 1, 2, \dots, L$ e $k = 1, 2, \dots, N-1$, onde

$$G_1 = \frac{(u)_{x_i}}{\Delta x_{i-1}} \quad (4.76)$$

$$G_2 = \frac{1}{\Delta z_{k-1}^\alpha \Gamma(2-\alpha)} \left[\frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \right] \quad (4.77)$$

$$G_3 = \frac{1}{\Delta z_k^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \right] \quad (4.78)$$

Para completar o sistema dado pela Eq. 4.75, tem-se ainda as equações para os contornos, dadas por

$$\left(-\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} + \frac{\Gamma(2 - \alpha)}{z_k^\alpha \Gamma(1 - \alpha)} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) = 0 \quad (4.79)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} + \frac{\Gamma(2 - \alpha)}{z_k^\alpha \Gamma(1 - \alpha)} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_{N-2}^\alpha}{\Delta z_1^\alpha} - \frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) + \dots + \\ & \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} - \frac{b_1^\alpha}{\Delta z_{N-2}^\alpha} \right) C(x_i, z_{N-1}) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} \right) C(x_i, z_N) = 0 \end{aligned} \quad (4.80)$$

$$C(x_0, z_k) = \frac{Q}{u(x_0, z_k)} \delta(z_k - H_s) \quad (4.81)$$

onde a função Delta de Dirac é aproximada pela Eq. 4.51.

4.5.7 Modelo 2D com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville nos termos advectivo e difusivo

A equação da advecção-difusão bidimensional com derivadas fracionárias nos termos advectivo e difusivo é dada pela Eq. 4.60

$$u \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C^y}{\partial z^\alpha} \right]$$

Analogamente ao processo de discretização apresentado na seção 4.5.2 e, com base na relação dada pela Eq.4.36, pode-se discretizar a Eq. 4.60, obtendo-se nesse caso o sistema

$$\begin{aligned} & \left[-G_1 b_{i-1}^\alpha + \frac{1}{x_i^\alpha \Gamma(1 - \alpha)} \right] C^y(x_0, z_k) + [G_1(b_{i-1}^\alpha - b_{i-2}^\alpha)] C^y(x_1, z_k) + \\ & [G_1(b_{i-2}^\alpha - b_{i-3}^\alpha)] C^y(x_2, z_k) + \dots + [G_1(b_1^\alpha - b_0^\alpha)] C^y(x_{i-1}, z_k) + \\ & [(G_1 + G_2 - G_3)b_0^\alpha + G_3 b_1^\alpha] C^y(x_i, z_k) + \left[G_2 b_{k-1}^\alpha - G_3 b_k^\alpha + \frac{1}{z_k^\alpha \Gamma(1 - \alpha)} \right] C^y(x_i, z_0) + \\ & [G_2(b_{k-1}^\alpha - b_{k-2}^\alpha) + G_3(b_k^\alpha - b_{k-1}^\alpha)] C^y(x_i, z_1) + \dots + \\ & [G_2(b_1^\alpha - b_0^\alpha) + G_3(b_2^\alpha - b_1^\alpha)] C^y(x_i, z_{k-1}) + [G_3 b_0^\alpha] C^y(x_i, z_{k+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.82)$$

para $i = 1, 2, \dots, L$ e $k = 1, 2, \dots, N - 1$, onde nesse caso os parâmetros G_1 , G_2 e G_3 são dados por

$$G_1 = \frac{(u)_{x_i}}{\Delta x_{i-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \quad (4.83)$$

$$G_2 = \frac{1}{\Delta z_{k-1}^\alpha \Gamma(2-\alpha)} \left[\frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \right] \quad (4.84)$$

$$G_3 = \frac{1}{\Delta z_k^\alpha \Gamma(2-\alpha)} \left[\frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \right] \quad (4.85)$$

Para completar o sistema dado pela Eq. 4.82, tem-se ainda as equações para os contornos, dadas por

$$\left(-\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} + \frac{\Gamma(2-\alpha)}{z_k^\alpha \Gamma(1-\alpha)} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) = 0 \quad (4.86)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} + \frac{\Gamma(2-\alpha)}{z_k^\alpha \Gamma(1-\alpha)} \right) C(x_i, z_0) + \left(\frac{b_{N-2}^\alpha}{\Delta z_1^\alpha} - \frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, z_1) + \dots + \\ & \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} - \frac{b_1^\alpha}{\Delta z_{N-2}^\alpha} \right) C(x_i, z_{N-1}) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} \right) C(x_i, z_N) = 0 \end{aligned} \quad (4.87)$$

$$C(x_0, z_k) = \frac{Q}{u(x_0, z_k)} \delta(z_k - H_s) \quad (4.88)$$

onde a função Delta de Dirac é aproximada pela Eq. 4.51.

4.5.8 Modelo 3D com derivadas fracionárias de Caputo nos termos advectivo e difusivos

A equação da advecção-difusão tridimensional é dada por

$$u \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial^\alpha C}{\partial y^\alpha} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial^\alpha C}{\partial z^\alpha} \right] \quad (4.89)$$

A Eq. 4.89, embora envolva três dimensões, pode ser discretizada de forma similar às equações bidimensionais. Desse modo, tem-se como resultado o sistema

$$\begin{aligned} & [-G_1 b_{i-1}^\alpha] C(x_0, y_j, z_k) + [G_1 (b_{i-1}^\alpha - b_{i-2}^\alpha)] C(x_1, y_j, z_k) + \\ & [G_1 (b_{i-2}^\alpha - b_{i-3}^\alpha)] C(x_2, y_j, z_k) + \dots + [G_1 (b_1^\alpha - b_0^\alpha)] C(x_{i-1}, y_j, z_k) + \\ & [(G_1 + G_2 - G_3 + G_4 - G_5) b_0^\alpha + (G_3 + G_4) b_1^\alpha] C(x_i, y_j, z_k) + \\ & [G_4 b_{j-1}^\alpha - G_5 b_j^\alpha] C(x_i, y_0, z_k) + [G_4 (b_{j-1}^\alpha - b_{j-2}^\alpha) + G_5 (b_j^\alpha - b_{j-1}^\alpha)] C(x_i, y_1, z_k) + \dots + \\ & [G_4 (b_1^\alpha - b_0^\alpha) + G_5 (b_2^\alpha - b_1^\alpha)] C(x_i, y_{j-1}, z_k) + [G_5 b_0^\alpha] C(x_i, y_{j+1}, z_k) \\ & [G_2 b_{k-1}^\alpha - G_3 b_k^\alpha] C(x_i, y_j, z_0) + [G_2 (b_{k-1}^\alpha - b_{k-2}^\alpha) + G_3 (b_k^\alpha - b_{k-1}^\alpha)] C(x_i, y_j, z_1) + \dots + \\ & [G_2 (b_1^\alpha - b_0^\alpha) + G_3 (b_2^\alpha - b_1^\alpha)] C(x_i, y_j, z_{k-1}) + [G_3 b_0^\alpha] C(x_i, y_j, z_{k+1}) = 0 \end{aligned} \quad (4.90)$$

onde, nesse caso, os parâmetros G_1 , G_2 , G_3 , G_4 e G_5 são dados por

$$G_1 = \frac{(u)_{x_i}}{\Delta x_{i-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \quad (4.91)$$

$$G_2 = \frac{1}{\Delta z_{k-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} - \frac{(K_z)_{z_{k+1}} - (K_z)_{z_k}}{\Delta z_{k+1}} \right] \quad (4.92)$$

$$G_3 = \frac{1}{\Delta z_k^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{-(K_z)_{z_k}}{\Delta z_k} \right] \quad (4.93)$$

$$G_4 = \frac{1}{\Delta y_{j-1}^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{(K_y)_{y_j}}{\Delta y_j} - \frac{(K_y)_{y_{j+1}} - (K_y)_{y_j}}{\Delta y_{j+1}} \right] \quad (4.94)$$

$$G_5 = \frac{1}{\Delta y_j^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{-(K_y)_{y_j}}{\Delta y_j} \right] \quad (4.95)$$

Para completar o sistema dado pela Eq. 4.90, tem-se ainda as equações para os contornos, dadas por

$$\left(-\frac{b_0^\alpha}{\Delta y_0^\alpha} \right) C(x_i, y_0, z_k) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta y_0^\alpha} \right) C(x_i, y_1, z_k) = 0 \quad (4.96)$$

$$\left(-\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, y_j, z_0) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, y_j, z_1) = 0 \quad (4.97)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{b_{M-1}^\alpha}{\Delta y_0^\alpha} \right) C(x_i, y_0, z_k) + \left(\frac{b_{M-2}^\alpha}{\Delta y_1^\alpha} - \frac{b_{M-1}^\alpha}{\Delta y_0^\alpha} \right) C(x_i, y_1, z_k) + \dots + \\ & \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta y_{M-1}^\alpha} - \frac{b_1^\alpha}{\Delta y_{M-2}^\alpha} \right) C(x_i, y_{M-1}, z_k) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta y_{M-1}^\alpha} \right) C(x_i, y_M, z_k) = 0 \end{aligned} \quad (4.98)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, y_j, z_0) + \left(\frac{b_{N-2}^\alpha}{\Delta z_1^\alpha} - \frac{b_{N-1}^\alpha}{\Delta z_0^\alpha} \right) C(x_i, y_j, z_1) + \dots + \\ & \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} - \frac{b_1^\alpha}{\Delta z_{N-2}^\alpha} \right) C(x_i, y_j, z_{N-1}) + \left(\frac{b_0^\alpha}{\Delta z_{N-1}^\alpha} \right) C(x_i, y_j, z_N) = 0 \end{aligned} \quad (4.99)$$

$$C(x_0, y_j, z_k) = \frac{Q}{u(x_0, y_j, z_k)} \delta(z_k - H_s) \delta(y_j - L_s) \quad (4.100)$$

onde as funções Delta de Dirac são aproximadas conforme a Eq. 4.51.

Os sistemas resultantes das discretizações apresentadas, nesse trabalho, são resolvidos numericamente pelo Método de Gauss-Seidel, utilizando-se como critério de parada a condição de que o Erro Absoluto Máximo entre as soluções obtidas na iteração i e na $i - 1$ fosse menor do 1.10^{-5} .

4.6 Testes de independência de malha

Para garantir que as malhas utilizadas nas simulações não tenham influências significativas nos resultados, é importante que sejam realizados testes de independência de malha. Em tais testes, grades com diferentes níveis de refinamento são empregadas em simulações a fim de se verificar uma redução sistemática dos erros (diferenças nos resultados obtidos) à medida em que as malhas vão sendo refinadas (Versteeg; Malalasekera, 2007). Nesse contexto, conduziram-se testes nos quais malhas com diferentes quantidades de pontos foram empregadas na simulação de experimentos (experimentos 7 e 22 de Prairie-Grass, experimento 5 de Copenhagen e experimento 1 de Hanford). Realizaram-se simulações empregando-se, em todos os casos, o modelo baseado na equação da advecção-difusão com derivadas fracionárias de Caputo nos termos advectivo e difusivo, tendo sido registradas as concentrações a diferentes distâncias da fonte e calculado o Erro Relativo Máximo (ER_{max}) entre as malhas, definido como o valor máximo do Erro Relativo (ER), calculado da seguinte forma

$$ER = \frac{|C(M_{p+1}) - C(M_p)|}{C(M_{p+1})} \quad (4.101)$$

onde M_p refere-se à malha p e C representa o valor de concentração obtido utilizando-se a respectiva malha.

Na Tab. 4.1 estão os valores de concentração encontrados nas simulações bidimensionais do experimento 5 de Copenhagen e o ER_{max} calculado para cada malha. Pode-se observar que o erro vai diminuindo à medida que a malha vai sendo refinada e que, mesmo possuindo o dobro de pontos, a M_4 fornece resultados muito parecidos com os da M_3 , com $ER_{max} < 5\%$, de modo que pode-se utilizar M_3 , com 84000 pontos nas simulações.

Tabela 4.1: Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Copenhagen.

Malha	Pontos	$C(2100m)$	$C(4200m)$	$C(6100m)$	ER_{max}
M_1	24000	11,61	9,14	7,16	25,38%
M_2	42000	9,26	7,37	5,98	14,12%
M_3	84000	8,29	6,52	5,24	4,80%
M_4	168000	7,91	6,28	5,08	—

Da mesma forma, foram realizados testes de independência de malha para as simulações bi-dimensionais de Prairie-Grass utilizando-se como parâmetros os experimentos 7 (para condições instáveis) e 22 (para condições estáveis). Os valores obtidos nas simulações dos experimentos 7 e 22 estão respectivamente na Tab. 4.2 e na Tab. 4.3. Nelas, pode-se verificar que o ER_{max} da malha M_3 em relação à malha M_4 também ficou abaixo dos 5% em ambos os casos. Em razão disso, para as simulações do experimento de Prairie-Grass, foram escolhidas as malhas M_3 , contendo 128000 pontos nos casos instáveis e 80000 pontos nos casos estáveis.

Além dos casos já mencionados, também foram realizados testes de malha para as simulações

Tabela 4.2: Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

Malha	Pontos	$C(50m)$	$C(100m)$	$C(200m)$	$C(400m)$	$C(800m)$	ER_{max}
1	32000	6,42	3,70	1,71	0,80	0,30	22,11%
2	64000	5,51	3,03	1,46	0,67	0,25	9,84%
3	128000	5,05	2,8	1,33	0,61	0,23	4,63%
4	256000	4,85	2,68	1,29	0,58	0,22	—

Tabela 4.3: Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

Malha	Pontos	$C(50m)$	$C(200m)$	$C(800m)$	ER_{max}
1	20000	20,24	3,98	1,11	15,20%
2	40000	17,57	3,46	0,97	9,84%
3	80000	16,2	3,15	0,9	4,90%
4	160000	15,7	3,03	0,86	—

bidimensionais do experimento de Hanford (Tab. 4.4) e para as simulações tridimensionais dos experimentos de Copenhagen (Tab. 4.5) e de Prairie-Grass, para condições instáveis (Tab. 4.6) e para condições estáveis (Tab. 4.7). Embora o ER_{max} tenha sido um pouco maior nesses casos, pode-se verificar que ele ficou na casa dos 10%. Em todas as situações, a malha selecionada foi, portanto, a M_3 : com 50000 pontos, para as simulações do experimento de Hanford (2D); com 1360000 pontos, para as simulações do experimento de Copenhagen (3D); com 1440000 pontos, para as simulações do experimento de Prairie-Grass (3D - condições instáveis); e com 1040000 pontos, para as simulações do experimento de Prairie-Grass (3D - condições estáveis).

Tabela 4.4: Teste de independência de malha para as simulações bidimensionais do Experimento de Hanford.

Malha	Pontos	$C(100m)$	$C(200m)$	$C(800m)$	$C(1600m)$	$C(3200m)$	ER_{max}
1	12500	0,0088	0,0065	0,0030	0,0021	0,0015	23,53%
2	25000	0,0072	0,0053	0,0025	0,0017	0,0012	18,00%
3	50000	0,0066	0,0050	0,0023	0,0015	0,0010	7,14%
4	100000	0,0063	0,0048	0,0022	0,0014	0,0010	—

A escolha das malhas M_3 em vez das malhas M_4 se deve ao fato de que, quanto maior é o número de pontos utilizados, maior também é o custo computacional, ou seja, o tempo necessário para a realização das simulações. Em razão disso, para uma seleção adequada, é importante levar em conta o custo-benefício de cada escolha: considerar o erro oriundo do refinamento, para que fique dentro de limites previamente estabelecidos e aceitáveis; e também o custo computacional, a fim de que a capacidade de realização das simulações com a infraestrutura disponível esteja assegurada.

Tabela 4.5: Teste de independência de malha para as simulações tridimensionais do Experimento de Copenhagen.

Malha	Pontos	$C(2100m)$	$C(4200m)$	$C(6100m)$	ER_{max}
1	340000	5,07	8,98	3,12	33,73%
2	680000	7,65	8,09	3,39	21,62%
3	1360000	9,76	7,33	3,81	8,53%
4	2720000	10,67	6,88	4,12	—

Tabela 4.6: Teste de independência de malha para as simulações tridimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

Malha	Pontos	$C(50m)$	$C(100m)$	$C(200m)$	$C(400m)$	$C(800m)$	ER_{max}
1	360000	379,10	73,82	13,27	1,05	0,22	29,94%
2	720000	329,98	61,52	12,56	1,12	0,17	20,14%
3	1440000	297,044	52,131	11,689	1,154	0,139	10,06%
4	2880000	273,017	48,11	11,765	1,18	0,1263	—

Tabela 4.7: Teste de independência de malha para as simulações tridimensionais do Experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

Malha	Pontos	$C(50m)$	$C(200m)$	$C(800m)$	ER_{max}
1	260000	541,94	107,50	19,71	26,00%
2	520000	437,05	85,32	16,13	16,78%
3	1040000	380,042	73,547	13,811	10,56%
4	2080000	352,038	68,399	12,49	—

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, são apresentados e discutidos os resultados obtidos por meio de simulações numéricas realizadas com base na equação da advecção-difusão, bidimensional e tridimensional, com derivadas fracionárias. Nos modelos bidimensionais, são empregadas derivadas fracionárias conforme as definições de Caputo e de Riemann-Liouville e são consideradas diferentes situações: derivada fracionária somente no termo advectivo; derivada fracionária somente no termo difusivo; e derivadas fracionárias em todos os termos da equação. Nos modelos tridimensionais, por sua vez, são consideradas derivadas fracionárias de Caputo em todos os termos da equação. Diante disso, para facilitar o entendimento, ao longo do texto, a seguinte nomenclatura é utilizada:

- **C-AF:** Modelo com derivada fracionária de Caputo no termo advectivo.
- **C-DF:** Modelo com derivada fracionária de Caputo no termo difusivo.
- **C-ADF:** Modelo com derivadas fracionárias de Caputo nos termos advectivo e difusivo.
- **RL-AF:** Modelo com derivada fracionária de Riemann-Liouville no termo advectivo.
- **RL-DF:** Modelo com derivada fracionária de Riemann-Liouville no termo difusivo.
- **RL-ADF:** Modelo com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville nos termos advectivo e difusivo.

Convém ressaltar que optou-se por considerar apenas as derivadas de Caputo nos modelos tridimensionais, não por haver qualquer impedimento em relação à utilização das derivadas de Riemann-Liouville, mas pelo fato de que foi necessário restringir o estudo a uma única definição em razão do custo computacional (tempo necessário para a realização das simulações) e também pelo fato da definição de Caputo permitir uma interpretação física mais realística do que a definição de Riemann-Liouville, especialmente na aplicação das condições de contorno dos problemas.

Para verificar os desempenhos dos modelos fracionários bidimensionais na representação dos problemas físicos reais foram simulados os experimentos de Copenhagen (Condições instáveis), de Hanford (Condições estáveis) e de Prairie-Grass (Condições estáveis e instáveis), tomando-se como base as concentrações integradas lateralmente à direção do vento medidas a diferentes distâncias da fonte. Já no caso dos modelos tridimensionais, foram simulados os experimentos de Copenhagen e de Prairie-Grass, utilizando-se as concentrações máximas, ou na linha central da pluma, registradas a diferentes distâncias da fonte. Para verificar a influência da ordem das derivadas nos resultados, foram feitas simulações para valores de $\alpha = 0,9$ até $\alpha = 0,999$ ($\alpha \approx 1$), variando-se 0,01, no caso dos modelos bidimensionais e de $\alpha = 0,85$ até $\alpha = 0,999$ ($\alpha \approx 1$), também variando-se 0,01, no caso dos modelos tridimensionais.

5.1 Modelos 2D com derivadas fracionárias no termo advectivo

A Fig. 5.1 apresenta o gráfico dos resultados numéricos de concentração, obtidos com o modelo C-AF, confrontados com os valores de concentração registrados no experimento de Copenhagen. A linha diagonal refere-se à solução idêntica ao experimento, de modo que quanto mais próximos dela estão os valores obtidos nas simulações, melhor é a aproximação do modelo aos dados experimentais. O intervalo entre as outras duas linhas indica os valores que estão dentro de um fator de dois (FA2), ou seja, indica se o valor de concentração predito está entre a metade e o dobro do valor de concentração registrado no experimento. Na imagem, pode-se verificar que, de modo geral, o modelo apresentou uma tendência a superestimar as concentrações, uma vez que a maior parte dos valores está abaixo da linha diagonal, o que indica que os valores simulados foram maiores do que os valores registrados no experimento. Entretanto, é também notório que a maioria dos resultados, independentemente dos valores de α considerados, permaneceu dentro de um fator de dois.

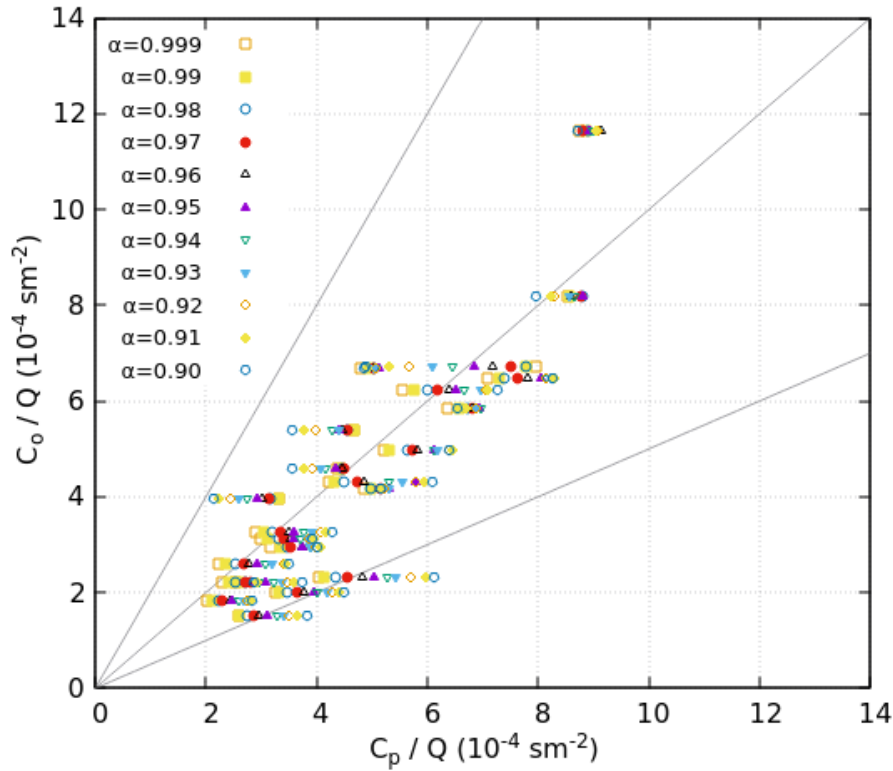


Figura 5.1: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.

Esses fatos ficam ainda mais evidentes quando se observam, na Tab. 5.1, os índices estatísticos calculados individualmente para cada valor de α considerado. De fato, nota-se que, quando $0,90 \leq \alpha \leq 0,93$, 87% das concentrações preditas estão dentro de um fator de dois (FA2), quando $\alpha = 0,94$ e quando $\alpha = 0,95$, 91,3% das concentrações estão dentro do FA2, quando $\alpha = 0,96$, 95,7% das concentrações estão dentro do FA2 e, quando $\alpha \geq 0,97$, todas as concentrações preditas estão dentro de um fator de dois.

Tabela 5.1: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento de Copenhagen.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,040	1,000	-0,004	0,913	0,180
0,99	0,038	1,000	-0,024	0,918	0,183
0,98	0,042	1,000	-0,049	0,910	0,185
0,97	0,047	1,000	-0,067	0,901	0,206
0,96	0,050	0,957	-0,081	0,899	0,218
0,95	0,062	0,913	-0,103	0,873	0,218
0,94	0,067	0,913	-0,103	0,862	0,242
0,93	0,074	0,870	-0,114	0,846	0,249
0,92	0,085	0,870	-0,115	0,815	0,262
0,91	0,099	0,870	-0,115	0,775	0,263
0,90	0,115	0,870	-0,107	0,730	0,281

Além desses pontos, também observa-se que o desvio fracional padrão (FS) ficou entre 0,180 e 0,281, com o melhor valor registrado para $\alpha = 0,999$ e o pior para $\alpha = 0,90$, o erro quadrático médio normalizado (NMSE) ficou no intervalo de 0,038 a 0,115, e o coeficiente de correlação (CC), de 0,730 a 0,918, tendo os melhores valores sido registrados, em ambos os casos, para $\alpha = 0,99$, bem parecidos com os valores registrados para $\alpha = 0,999$, e os piores, para $\alpha = 0,90$.

A Fig. 5.2 e a Tab. 5.2 apresentam os resultados obtidos pelo modelo C-AF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis). Novamente observa-se a tendência do modelo, bem maior inclusive do que a verificada no experimento de Copenhagen, de superestimar as concentrações. Não obstante, também é possível observar que, no caso do experimento de Prairie-Grass, há um número menor de valores dentro de um fator de dois e erros quadráticos médios normalizados sensivelmente maiores do que os verificados no experimento de Copenhagen.

Convém ressaltar que a maior dificuldade desse modelo na simulação do experimento de Prairie-Grass está claramente na estimativa das menores concentrações, aquelas registradas mais distantes da fonte e que, por terem uma magnitude muito pequena, geralmente são superestimadas. Esse comportamento não surpreende, uma vez que é algo frequentemente observado nos modelos encontrados na literatura.

O fato é que nas simulações bidimensionais dos experimentos que foram realizados sob condições atmosféricas instáveis, tanto de Copenhagen quanto de Prairie-Grass, os modelos com derivadas fracionárias, seja de Caputo, seja de Riemann-Liouville, levaram a resultados semelhantes onde os desempenhos dos modelos caíram à medida em que a ordem da derivada se afastou de 1, com os melhores resultados tendo sido verificados em geral para $\alpha \geq 0,99$.

Na Tab. 5.3 e na Tab. 5.4 estão os índices estatísticos calculados para avaliar o desempenho do modelo RL-AF nas simulações dos experimentos de Copenhagen e de Prairie-Grass (Condições Instáveis), respectivamente. Comparando esses resultados com aqueles obtidos pelo

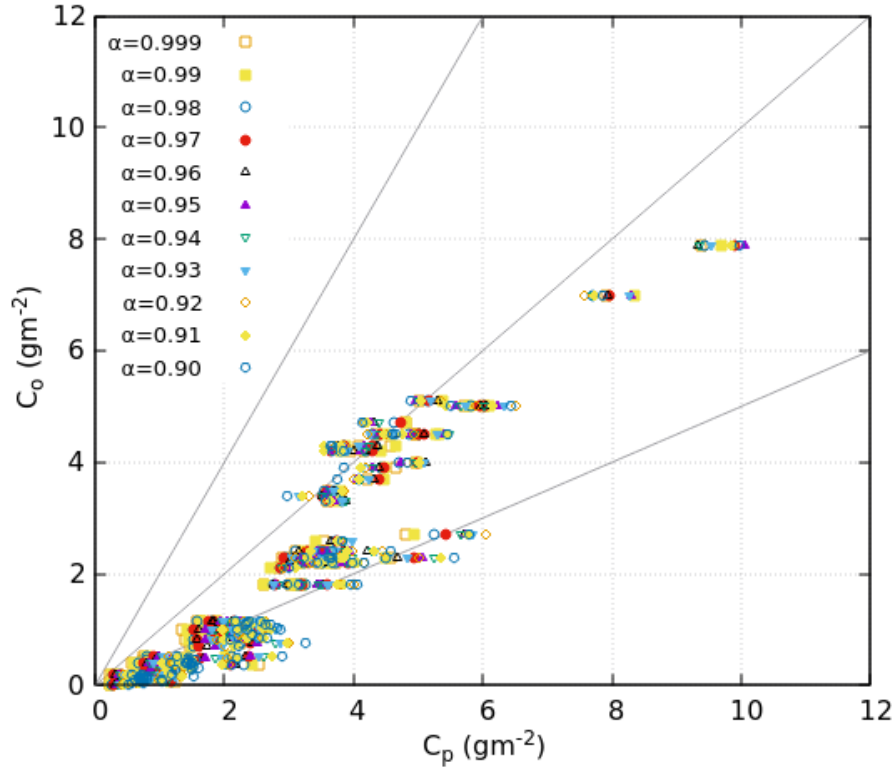


Figura 5.2: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

Tabela 5.2: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,093	0,674	-0,316	0,963	-0,070
0,99	0,100	0,621	-0,338	0,966	-0,095
0,98	0,106	0,568	-0,341	0,958	-0,052
0,97	0,127	0,516	-0,370	0,952	-0,075
0,96	0,135	0,505	-0,386	0,950	-0,053
0,95	0,151	0,453	-0,402	0,941	-0,057
0,94	0,161	0,442	-0,418	0,939	-0,033
0,93	0,174	0,400	-0,431	0,934	-0,031
0,92	0,194	0,389	-0,445	0,921	-0,019
0,91	0,205	0,379	-0,462	0,920	-0,003
0,90	0,225	0,368	-0,476	0,909	0,004

modelo C-AF (Tab. 5.3 e Tab. 5.4), nota-se que ambas as formulações para a derivada fracionária da equação levaram a resultados muito parecidos, tendo os desempenhos dos modelos atingido valores bem próximos em todos os índices considerados. Tem-se, no caso do experimento do Copenhagen, de 87% (para $0,90 \leq \alpha \leq 0,94$) a 100% (para $0,97 \leq \alpha \leq 0,999$) dos dados dentro de um fator de dois. No caso do experimento de Prairie-Grass, por outro lado,

tem-se de 36,8% (para $\alpha = 0,90$) a 67,4% dos dados (para $\alpha = 0,999$) dentro de um fator de dois.

Tabela 5.3: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento Copenhagen.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,042	1,000	-0,006	0,909	0,177
0,99	0,040	1,000	-0,030	0,912	0,179
0,98	0,042	1,000	-0,051	0,910	0,189
0,97	0,046	1,000	-0,070	0,905	0,202
0,96	0,051	0,957	-0,087	0,896	0,214
0,95	0,060	0,913	-0,105	0,878	0,223
0,94	0,066	0,870	-0,110	0,865	0,238
0,93	0,075	0,870	-0,119	0,845	0,251
0,92	0,088	0,870	-0,120	0,810	0,257
0,91	0,101	0,870	-0,119	0,774	0,265
0,90	0,115	0,870	-0,116	0,732	0,269

Da mesma forma, na Fig. 5.3 e na Fig. 5.4 são apresentados, respectivamente, os gráficos de espalhamento dos experimentos de Copenhagen e de Prairie-Grass comparando os dados observacionais e simulados. Novamente, fica evidente a semelhança entre os resultados obtidos pelos modelos C-AF e RL-AF nas simulações de ambos os experimentos, uma vez que o RL-AF também apresentou claramente a tendência a superestimar as concentrações.

Tabela 5.4: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,092	0,674	-0,315	0,965	-0,078
0,99	0,100	0,621	-0,332	0,963	-0,077
0,98	0,109	0,568	-0,348	0,959	-0,070
0,97	0,120	0,547	-0,364	0,955	-0,061
0,96	0,131	0,505	-0,380	0,951	-0,052
0,95	0,143	0,484	-0,395	0,946	-0,041
0,94	0,156	0,432	-0,410	0,940	-0,030
0,93	0,170	0,421	-0,425	0,934	-0,017
0,92	0,185	0,389	-0,439	0,927	-0,004
0,91	0,200	0,379	-0,453	0,920	0,012
0,90	0,217	0,368	-0,466	0,911	0,028

Nas simulações dos experimentos realizados sob condições atmosféricas estáveis, por sua vez, o modelo C-AF apresentou um comportamento diferente daquele apresentado nas simulações

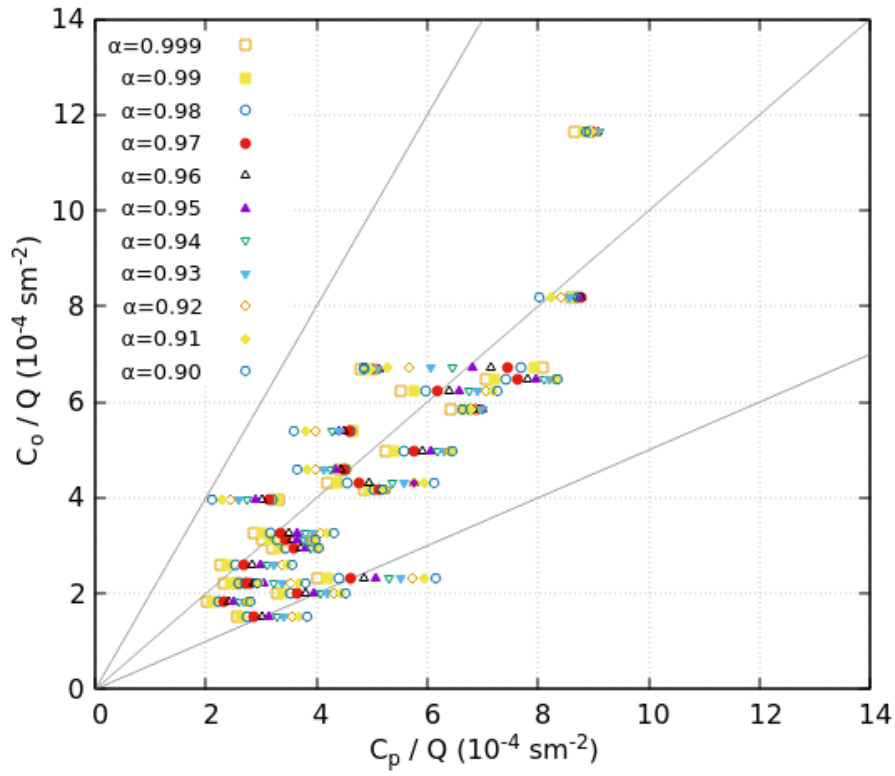


Figura 5.3: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.

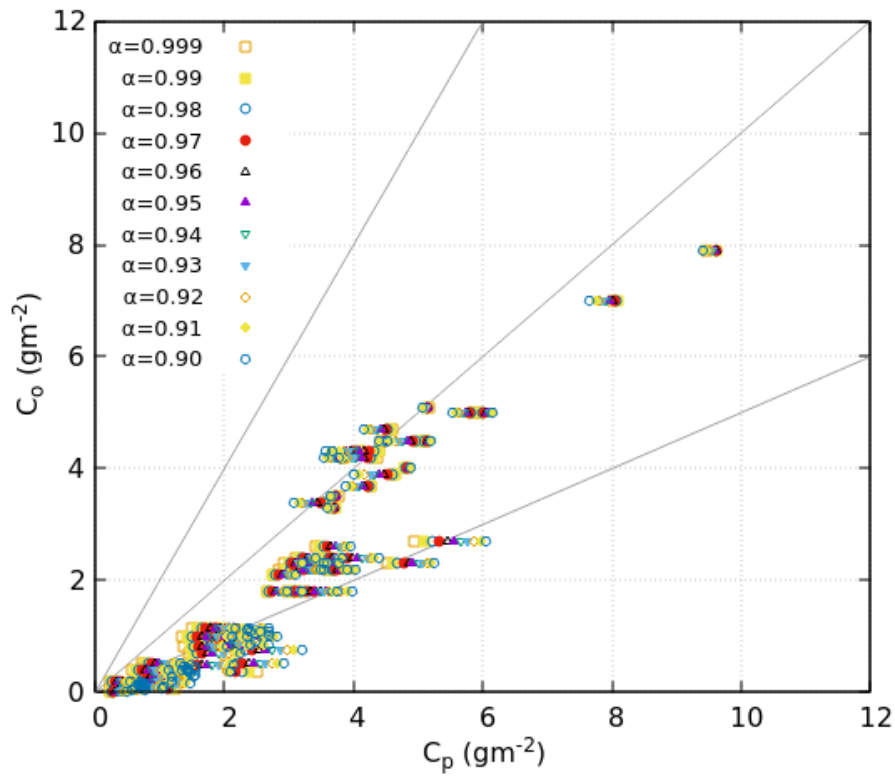


Figura 5.4: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

dos experimentos realizados sob condições instáveis, como se pode observar na Tab. 5.5 (Prairie-Grass - condições estáveis) e na Tab. 5.6 (Hanford), onde são apresentados os índices estatísticos atingidos nas simulações de ambos os experimentos.

Ao observar a Tab. 5.5, é possível verificar que o modelo C-AF apresentou uma tendência a subestimar as concentrações ($FB > 0$) ao serem considerados valores de $0,96 \leq \alpha \leq 0,999$ e uma tendência a superestimá-las ($FB < 0$), ao serem considerados valores de $0,90 \leq \alpha \leq 0,95$. Ainda em termos de FB, seu valor ótimo é zero de modo que, quanto mais perto de zero for o valor obtido, melhor é o desempenho do modelo neste quesito. Como pode-se verificar então, o melhor valor encontrado nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) para o FB foi -0,015, obtido com $\alpha = 0,95$, valor de α que, inclusive, forneceu o melhor valor do NMSE (0,183). Com $\alpha \approx 1$, tem-se 56% dos dados dentro de um fator de dois e à medida em que o valor de α decresce, a quantidade de valores dentro do FA2 aumenta, atingindo a sua maior marca (93,3%) quando $\alpha = 0,98$. É, portanto, notório que o desempenho do modelo em praticamente todos os quesitos foi melhor para valores de $0,94 \leq \alpha \leq 0,99$ do que para $\alpha \approx 1$.

Tabela 5.5: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,653	0,560	0,612	0,843	0,698
0,99	0,432	0,853	0,432	0,841	0,592
0,98	0,310	0,933	0,284	0,850	0,547
0,97	0,244	0,880	0,156	0,837	0,482
0,96	0,221	0,853	0,088	0,829	0,445
0,95	0,183	0,760	-0,015	0,836	0,383
0,94	0,194	0,627	-0,203	0,810	0,255
0,93	0,220	0,547	-0,280	0,796	0,190
0,92	0,246	0,493	-0,346	0,792	0,135
0,91	0,339	0,453	-0,480	0,775	0,030
0,90	0,387	0,400	-0,532	0,766	-0,008

No caso do experimento de Hanford, por sua vez, como pode-se observar na Tab. 5.6, a melhoria no desempenho do modelo quando a ordem da derivada se afasta de 1 é ainda mais clara. Novamente, em praticamente todos os quesitos, o desempenho foi melhor para valores de $0,90 \leq \alpha \leq 0,99$ do que para $\alpha \approx 1$. Apenas nos quesito CC é que o modelo com $\alpha \approx 1$ manteve-se no mesmo nível dos demais. Em relação ao erro quadrático médio normalizado (NMSE) e ao desvio fracional padrão (FS), por exemplo, quedas acentuadas nos valores de ambos os parâmetros foram observadas à medida em que a ordem da derivada foi sendo decrescida.

Diferentemente do que se verificou nas simulações dos experimentos estáveis de Prairie-Grass, nas simulações dos experimentos de Hanford observou-se $FB > 0$ para todos os valores de α considerados, de modo que nesse caso a tendência do modelo foi realmente a de subestimar

as concentrações. Essa diferença entre os comportamentos do modelo C-AF nas simulações de Prairie-Grass e de Hanford pode ser verificada com ainda mais clareza na Fig. 5.5 (Prairie-Grass - Condições Estáveis) e na Fig. 5.6 (Hanford), onde os valores, no experimento de Prairie-Grass estão bem espalhados acima e abaixo da linha diagonal enquanto que, no experimento de Hanford, os valores estão evidentemente mais localizados acima da referida linha.

Da mesma forma como foi observado nas simulações dos experimentos instáveis de Prairie-Grass e de Copenhagen, nos experimentos estáveis também foram obtidos resultados parecidos ao se alterar a formulação da derivada fracionária, de Caputo para Riemann-Liouville. Na Tab. 5.7 estão os índices estatísticos do modelo RL-AF nas simulações dos experimentos estáveis de Prairie-Grass. Assim como aconteceu com o modelo C-AF, o modelo RL-AF também apresentou uma tendência a subestimar as concentrações ($FB > 0$) ao serem considerados valores de $0,96 \leq \alpha \leq 0,999$ e uma tendência a superestimá-las ($FB < 0$), para valores de $0,90 \leq \alpha \leq 0,95$. Na Tab. 5.8, por sua vez, estão os índices estatísticos obtidos pelo mesmo modelo, porém nas simulações do experimento de Hanford. Pode-se observar que, em todos os quesitos, as diferenças são de fato muito pequenas e que ambas as formulações das derivadas levaram a desempenhos semelhantes dos modelos.

Tabela 5.6: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-AF nas simulações do experimento de Hanford.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,784	0,667	0,677	0,916	0,819
0,99	0,698	0,767	0,625	0,912	0,781
0,98	0,619	0,833	0,582	0,917	0,747
0,97	0,543	0,867	0,529	0,917	0,709
0,96	0,458	0,867	0,476	0,920	0,654
0,95	0,419	0,900	0,436	0,919	0,633
0,94	0,378	0,933	0,407	0,920	0,601
0,93	0,298	0,900	0,332	0,925	0,540
0,92	0,248	0,900	0,252	0,909	0,468
0,91	0,182	0,933	0,159	0,912	0,382
0,90	0,172	0,933	0,126	0,907	0,355

Essa semelhança nos desempenhos dos modelos C-AF e RL-AF nas simulações dos casos estáveis fica ainda mais evidente quando se comparam os gráficos de espalhamento do modelo RL-AF (Fig. 5.7 e Fig. 5.8) com os gráficos do modelo C-AF (Fig. 5.5 e Fig. 5.6), onde se pode observar com clareza que os resultados foram realmente muito parecidos.

5.2 Modelos 2D com derivadas fracionárias no termo difusivo

Na Tab. 5.9 e na Tab. 5.10 são apresentados, respectivamente, os índices estatísticos obtidos com os modelos C-DF nas simulações dos experimentos de Copenhagen e de Prairie-

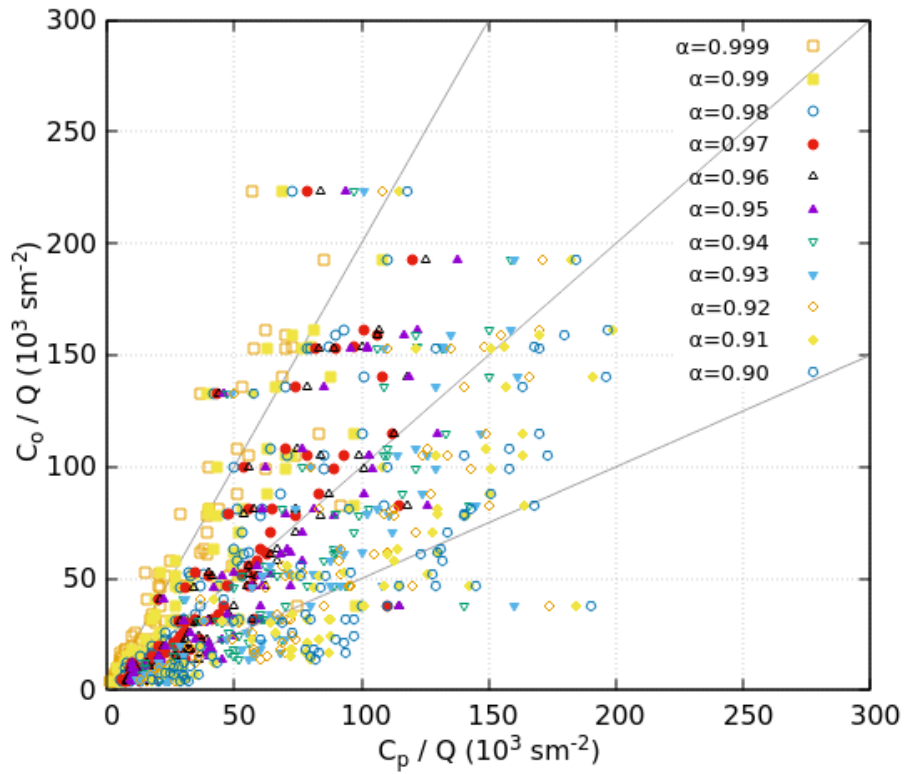


Figura 5.5: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

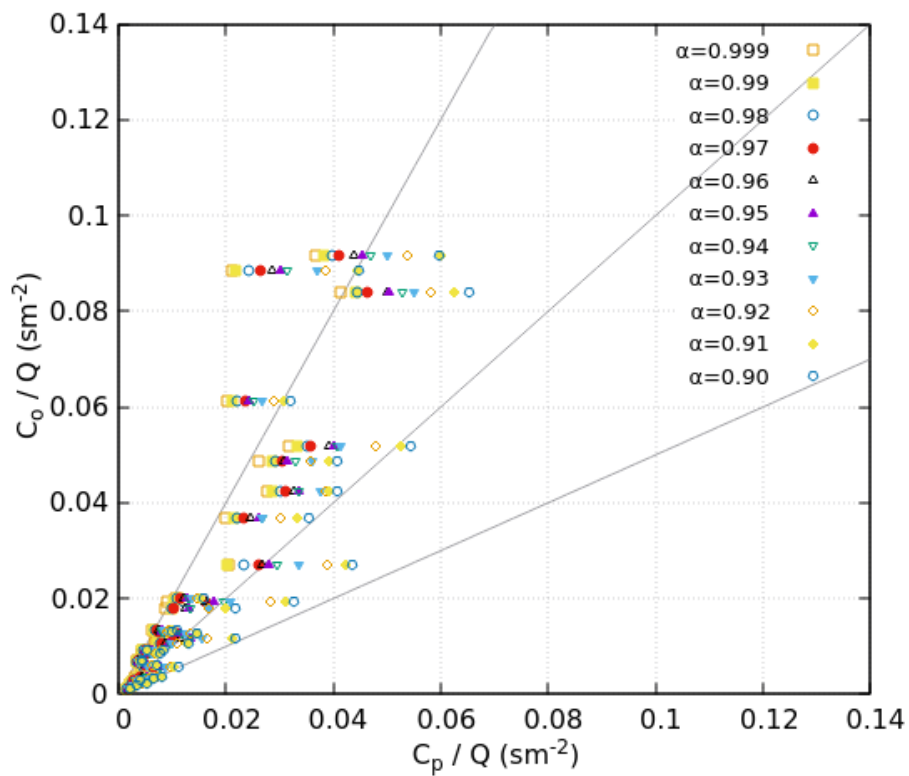


Figura 5.6: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.

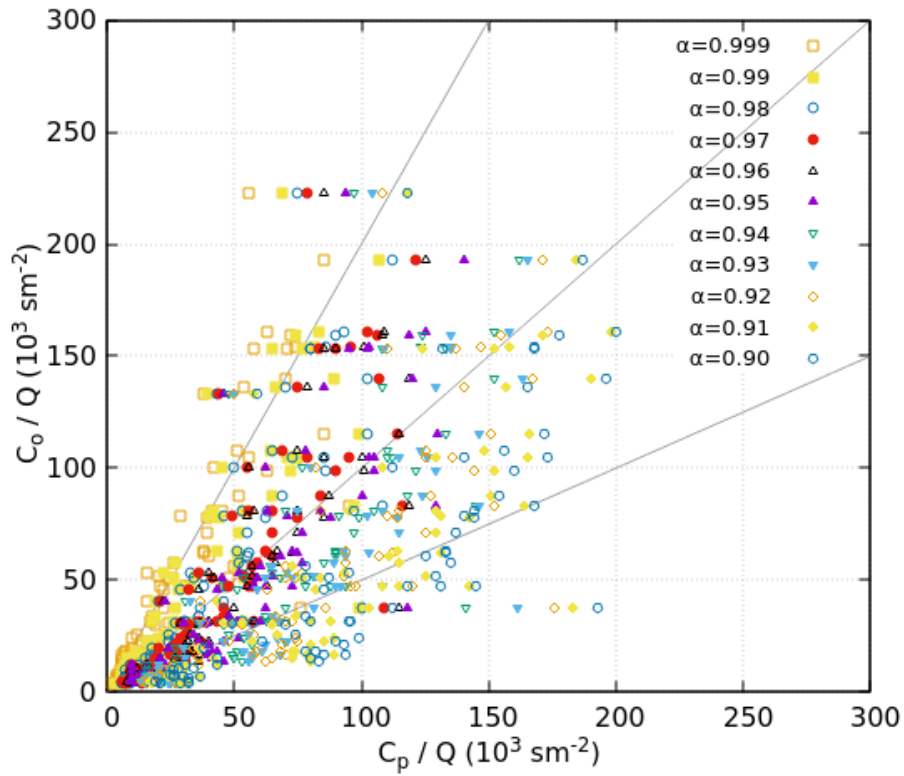


Figura 5.7: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

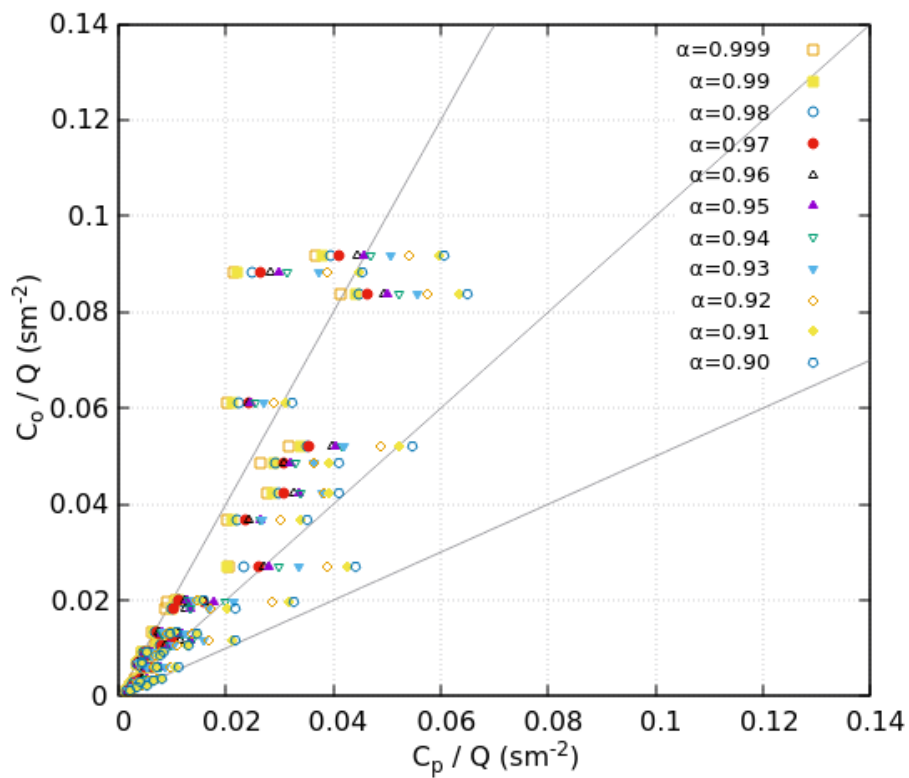


Figura 5.8: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-AF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.

Tabela 5.7: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,649	0,560	0,606	0,838	0,692
0,99	0,428	0,867	0,426	0,839	0,588
0,98	0,306	0,933	0,281	0,852	0,546
0,97	0,243	0,880	0,152	0,836	0,481
0,96	0,217	0,853	0,084	0,830	0,442
0,95	0,185	0,747	-0,020	0,832	0,377
0,94	0,193	0,627	-0,208	0,811	0,249
0,93	0,219	0,547	-0,285	0,798	0,186
0,92	0,251	0,493	-0,351	0,789	0,130
0,91	0,337	0,453	-0,483	0,779	0,031
0,90	0,392	0,400	-0,537	0,766	-0,013

Tabela 5.8: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-AF nas simulações do experimento de Hanford.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,780	0,667	0,673	0,916	0,819
0,99	0,692	0,767	0,622	0,912	0,778
0,98	0,614	0,833	0,581	0,920	0,746
0,97	0,539	0,867	0,527	0,919	0,708
0,96	0,456	0,867	0,474	0,919	0,651
0,95	0,417	0,900	0,432	0,918	0,631
0,94	0,378	0,933	0,403	0,919	0,600
0,93	0,290	0,900	0,324	0,924	0,531
0,92	0,245	0,900	0,247	0,909	0,465
0,91	0,179	0,933	0,153	0,912	0,378
0,90	0,166	0,933	0,121	0,909	0,348

Grass (Condições Instáveis). Em ambos os casos, pode-se perceber que há uma tendência do modelo de superestimar as concentrações ($FB < 0$) e que o desempenho dele melhora à medida em que a ordem da derivada fracionária diminui. No caso do experimento de Copenhagen, essa melhoria no desempenho é mais sutil em razão dos resultados para $\alpha \approx 1$ já serem muito bons, com 100% dos dados dentro de um fator de dois (FA2) e erro quadrático médio normalizado (NMSE) de 0,042. Entretanto, ainda assim, para $\alpha = 0,96$ por exemplo, o NMSE cai para 0,036 com os mesmos 100% dos dados dentro do FA2. Na Fig. 5.9 e na Fig. 5.10 estão os gráficos de espalhamento.

No caso dos experimentos estáveis de Prairie-Grass e Hanford o que se observou, por outro lado, foi uma queda no desempenho geral do modelo à medida em que a ordem da derivada

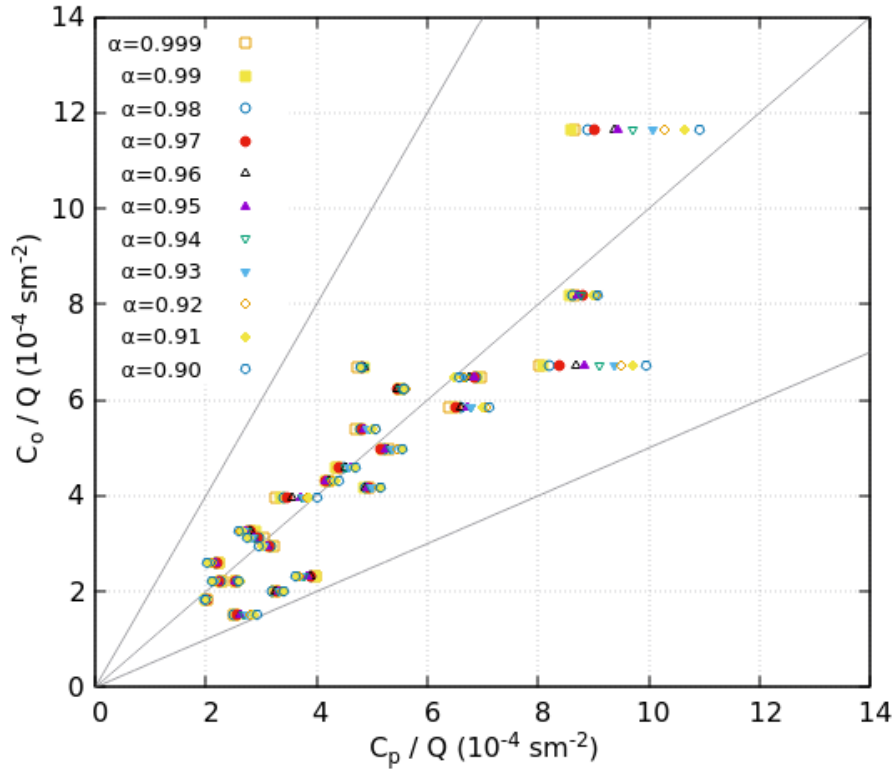


Figura 5.9: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.

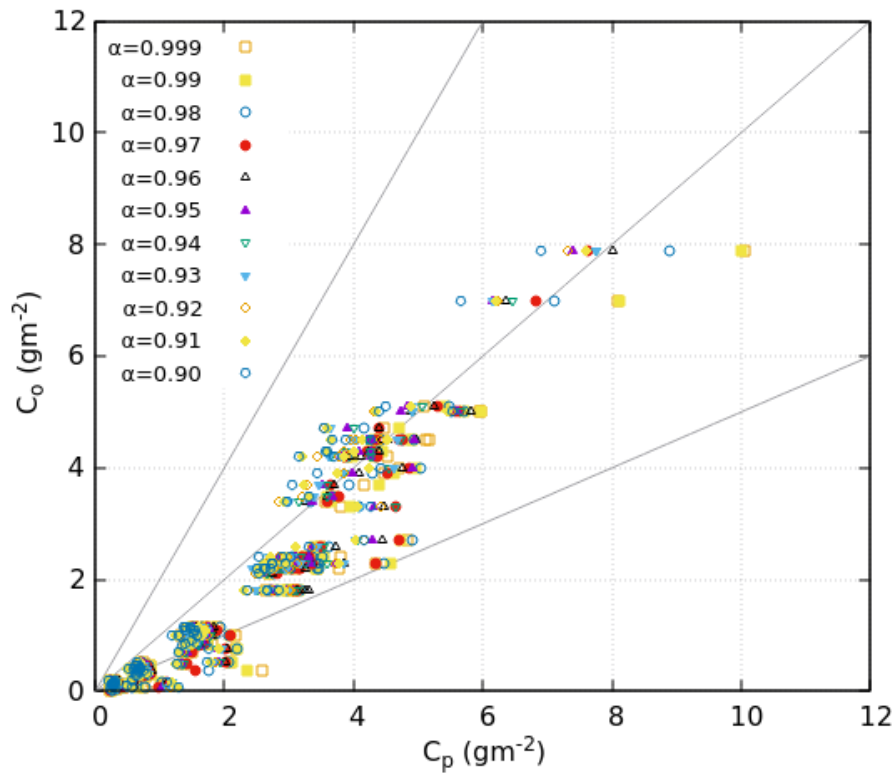


Figura 5.10: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

Tabela 5.9: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Copenhagen.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,042	1,000	-0,003	0,909	0,176
0,99	0,041	1,000	-0,002	0,911	0,179
0,98	0,037	1,000	-0,008	0,917	0,152
0,97	0,038	1,000	-0,011	0,915	0,139
0,96	0,036	1,000	-0,019	0,918	0,113
0,95	0,037	1,000	-0,024	0,916	0,098
0,94	0,036	1,000	-0,030	0,917	0,075
0,93	0,038	1,000	-0,039	0,915	0,037
0,92	0,039	1,000	-0,049	0,915	0,019
0,91	0,039	1,000	-0,054	0,914	-0,002
0,90	0,042	1,000	-0,062	0,913	-0,031

Tabela 5.10: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,093	0,653	-0,318	0,965	-0,093
0,99	0,089	0,663	-0,314	0,968	-0,091
0,98	0,081	0,705	-0,293	0,966	-0,037
0,97	0,077	0,663	-0,281	0,965	-0,001
0,96	0,068	0,705	-0,259	0,967	0,013
0,95	0,061	0,726	-0,228	0,967	0,059
0,94	0,058	0,737	-0,221	0,969	0,048
0,93	0,056	0,726	-0,196	0,966	0,078
0,92	0,059	0,726	-0,178	0,961	0,104
0,91	0,054	0,737	-0,164	0,964	0,109
0,90	0,059	0,768	-0,138	0,958	0,147

fracionária diminuiu. Em ambos os casos, o que se percebeu foi uma forte tendência do modelo de subestimar as concentrações. O fato é que o modelo com $\alpha \approx 1$ já apresentava tal tendência e a alteração na ordem da derivada fez com que a difusão se intensificasse e, conseqüentemente, as concentrações diminuíssem ainda mais. Na Tab. 5.11 estão os índices estatísticos do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) e na Tab. 5.12 estão os índices do experimento de Hanford.

A forte tendência do modelo de subestimar as concentrações nas simulações dos experimentos estáveis pode ser observada com ainda mais clareza nos gráficos de espalhamento apresentados na Fig. 5.11 (experimento de Prairie-Grass) e Fig. 5.12 (experimento de Hanford).

Além dos resultados gerais do experimento de Hanford apresentados na Tab. 5.12, também

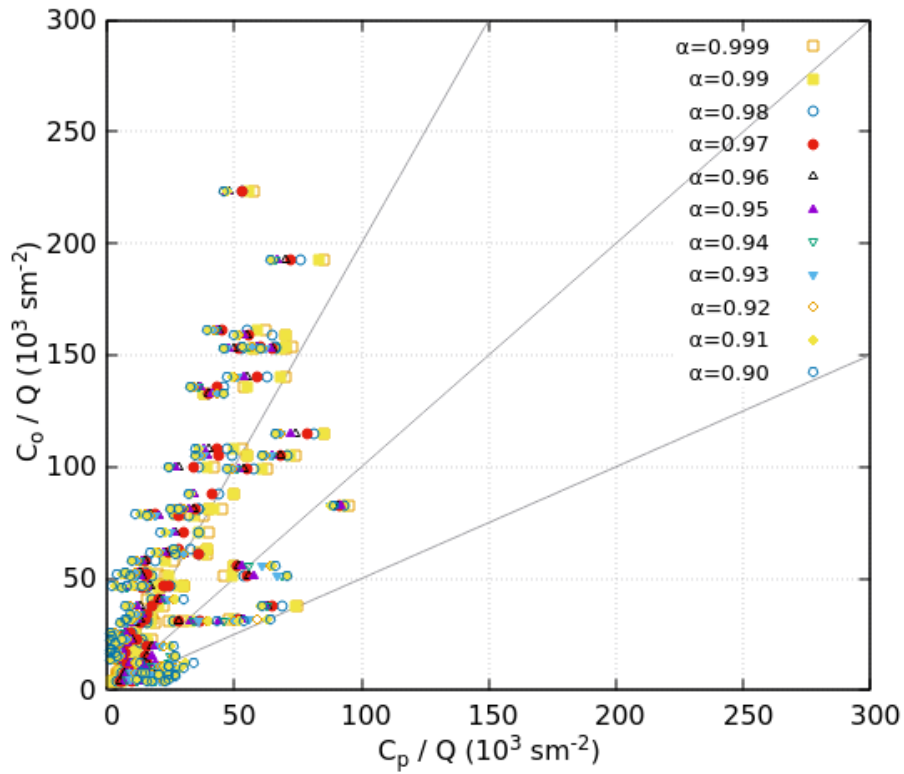


Figura 5.11: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

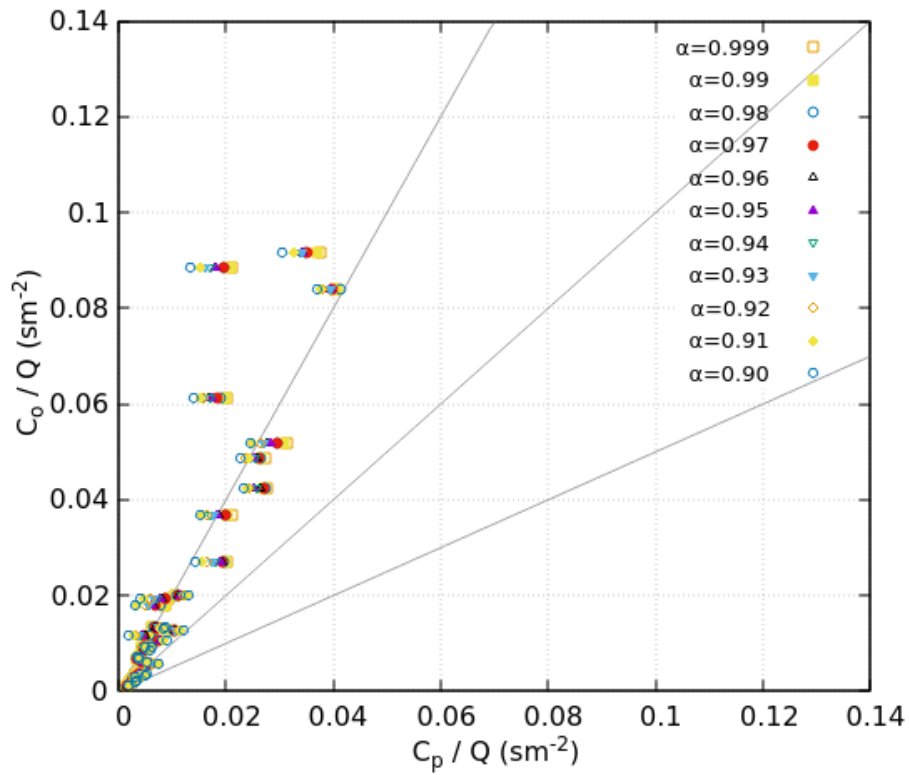


Figura 5.12: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.

Tabela 5.11: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,656	0,533	0,614	0,842	0,696
0,99	0,696	0,587	0,618	0,831	0,730
0,98	0,822	0,480	0,665	0,805	0,780
0,97	0,964	0,347	0,701	0,768	0,835
0,96	1,094	0,320	0,749	0,736	0,846
0,95	1,140	0,293	0,746	0,710	0,861
0,94	1,211	0,267	0,739	0,657	0,864
0,93	1,231	0,253	0,729	0,633	0,863
0,92	1,259	0,227	0,727	0,610	0,857
0,91	1,320	0,200	0,732	0,575	0,848
0,90	1,358	0,200	0,735	0,552	0,838

Tabela 5.12: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Hanford.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,775	0,667	0,672	0,917	0,817
0,99	0,800	0,667	0,682	0,917	0,832
0,98	0,855	0,700	0,693	0,905	0,854
0,97	0,873	0,733	0,696	0,905	0,866
0,96	0,946	0,733	0,716	0,895	0,894
0,95	0,947	0,700	0,716	0,898	0,898
0,94	0,983	0,700	0,727	0,891	0,908
0,93	1,018	0,700	0,736	0,887	0,922
0,92	1,101	0,667	0,758	0,879	0,953
0,91	1,136	0,667	0,767	0,873	0,963
0,90	1,256	0,667	0,785	0,845	0,996

apresentam-se aqui, na Tab. 5.13 e na Tab. 5.14, os resultados obtidos para diferentes distâncias da fonte: Na Tab. 5.13, os resultados de 100 a 800 metros da fonte; na Tab. 5.14, os resultados de 1600 a 3200 metros. Observando-as nota-se que o desempenho do modelo na predição das concentrações mais próximas da fonte é bem parecido com seu desempenho geral, considerando todas as distâncias. Entretanto, na predição das concentrações mais distantes da fonte, verifica-se uma inversão: o desempenho do modelo melhora, quando a ordem da derivada diminui.

Na Fig. 5.13 (Copenhagen), na Fig. 5.14 (Prairie-Grass - Condições Instáveis), na Fig. 5.15 (Prairie-Grass - Condições Estáveis) e na Fig. 5.16 (Hanford) podem ser vistos os resultados obtidos pelo modelo RL-DF que, como se pode perceber, são muito parecidos com os obtidos pelo modelo C-DF (Fig. 5.9, Fig. 5.10, Fig. 5.11 e Fig. 5.12).

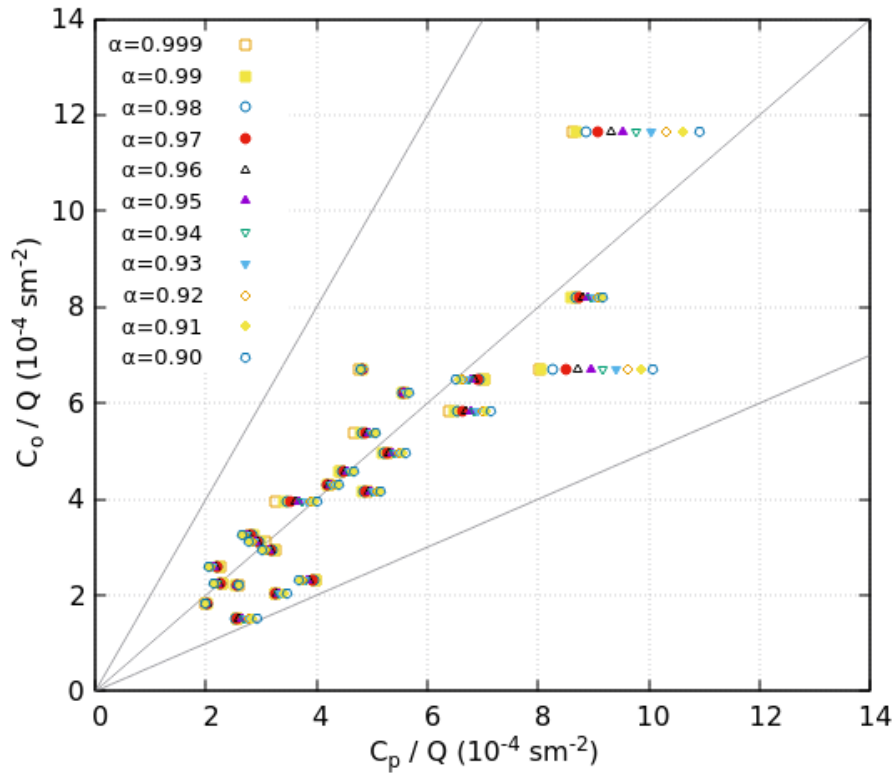


Figura 5.13: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.

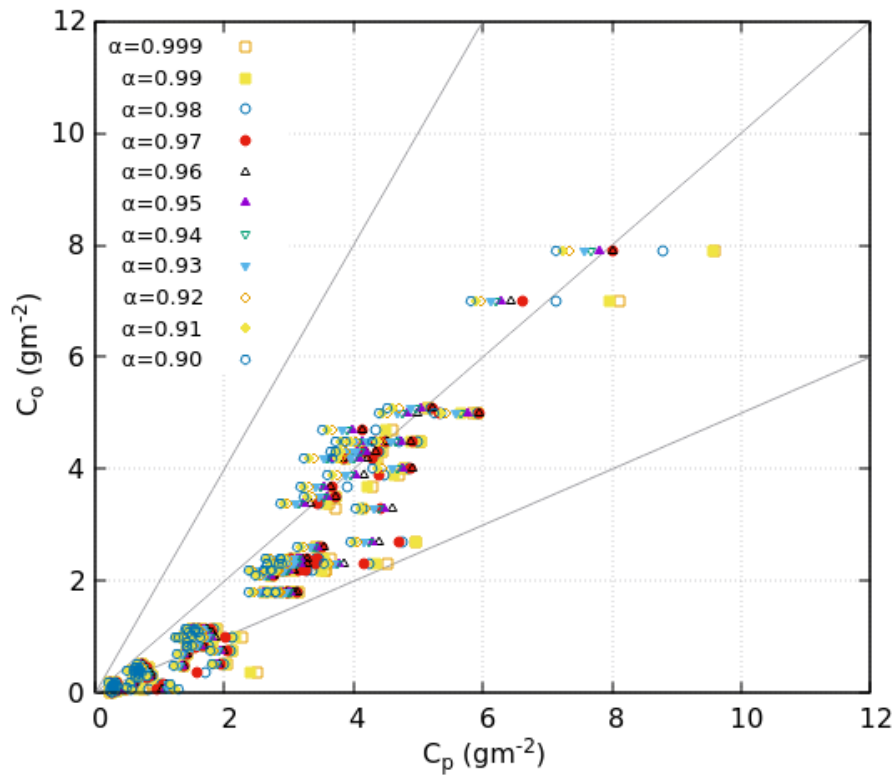


Figura 5.14: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

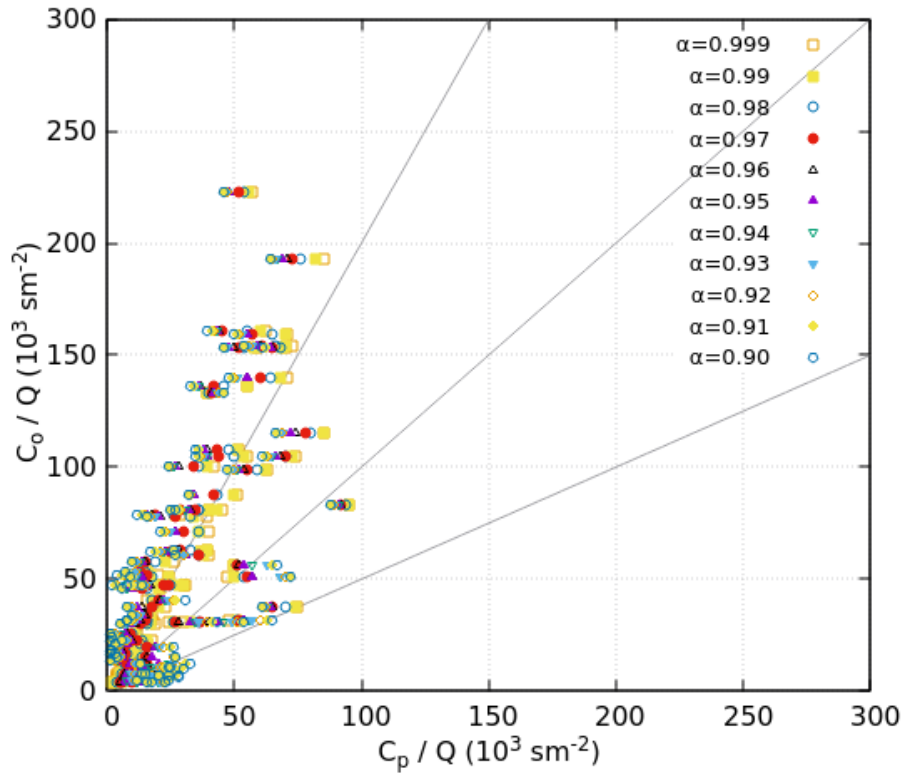


Figura 5.15: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

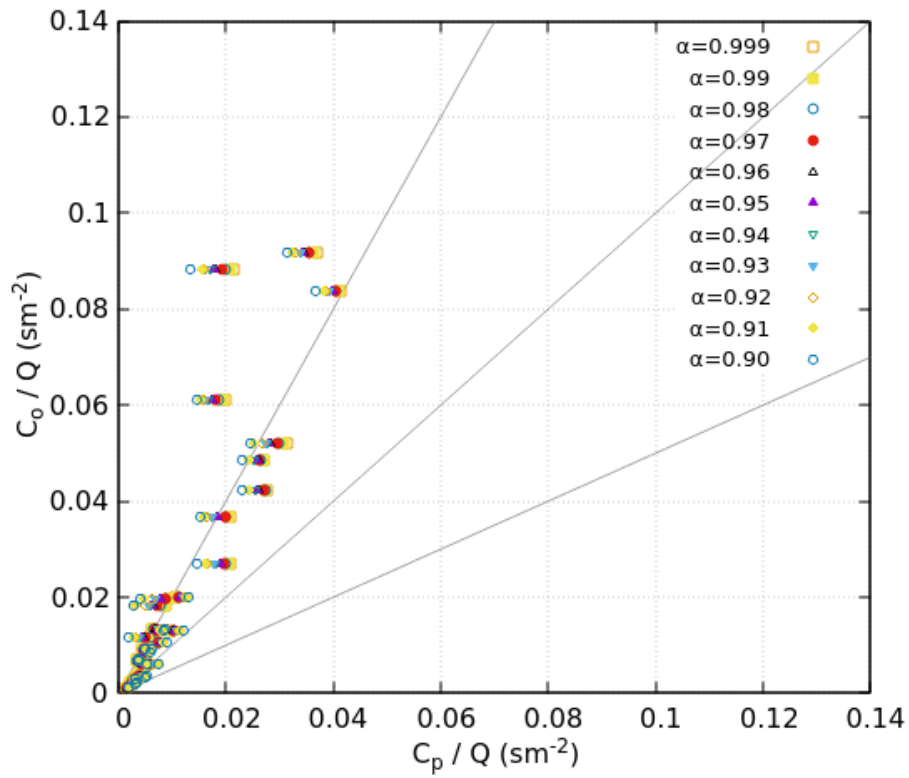


Figura 5.16: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-DF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.

Tabela 5.13: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Hanford, de 100m a 800m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,782	0,611	0,695	0,876	0,855
0,99	0,808	0,611	0,708	0,877	0,866
0,98	0,866	0,611	0,724	0,859	0,886
0,97	0,885	0,611	0,733	0,859	0,894
0,96	0,961	0,611	0,757	0,844	0,920
0,95	0,962	0,556	0,759	0,848	0,924
0,94	1,000	0,556	0,774	0,839	0,927
0,93	1,037	0,556	0,787	0,834	0,936
0,92	1,123	0,500	0,813	0,823	0,966
0,91	1,160	0,444	0,827	0,815	0,969
0,90	1,287	0,444	0,856	0,778	0,993

Tabela 5.14: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-DF nas simulações do experimento de Hanford, de 1600m a 3200m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,396	0,750	0,484	0,944	0,860
0,99	0,379	0,750	0,467	0,941	0,856
0,98	0,342	0,833	0,440	0,937	0,818
0,97	0,315	0,917	0,405	0,927	0,815
0,96	0,306	0,917	0,399	0,929	0,804
0,95	0,286	0,917	0,381	0,931	0,787
0,94	0,287	0,917	0,367	0,897	0,781
0,93	0,262	0,917	0,342	0,905	0,769
0,92	0,262	0,917	0,340	0,901	0,768
0,91	0,244	1,000	0,319	0,905	0,761
0,90	0,215	1,000	0,271	0,867	0,696

5.3 Modelos 2D com derivadas fracionárias nos termos advectivo e difusivo

Os índices estatísticos das simulações do experimento de Copenhagen empregando o modelo C-ADF estão na Tab. 5.15. Nela, pode-se observar que o desempenho do modelo foi muito bom para todos os valores de α considerados. O maior valor de NMSE foi de 0,066, registrado para $\alpha = 0,90$ e o menor foi de 0,037, para $\alpha = 0,99$. Não obstante, as simulações com $\alpha = 0,99$, como se pode verificar, forneceram os melhores índices em todos os quesitos, algo que também verificou-se com o emprego do modelo RL-ADF (Tab. 5.16).

Na Fig. 5.17 e na Fig. 5.18 estão, respectivamente, os gráficos de espalhamento do experi-

Tabela 5.15: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Copenhagen.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,045	1,000	-0,012	0,900	0,172
0,99	0,037	1,000	-0,001	0,919	0,148
0,98	0,038	1,000	-0,011	0,916	0,163
0,97	0,041	1,000	0,003	0,912	0,185
0,96	0,042	1,000	0,013	0,914	0,203
0,95	0,044	1,000	0,026	0,913	0,218
0,94	0,047	1,000	0,041	0,911	0,242
0,93	0,051	1,000	0,059	0,910	0,258
0,92	0,052	1,000	0,071	0,911	0,262
0,91	0,061	1,000	0,089	0,902	0,296
0,90	0,066	1,000	0,109	0,905	0,316

Tabela 5.16: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento Copenhagen.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,044	1,000	-0,008	0,902	0,171
0,99	0,039	1,000	0,004	0,916	0,159
0,98	0,040	1,000	-0,004	0,914	0,178
0,97	0,041	1,000	0,007	0,914	0,192
0,96	0,042	1,000	0,020	0,914	0,208
0,95	0,044	1,000	0,034	0,913	0,225
0,94	0,047	1,000	0,048	0,913	0,242
0,93	0,050	1,000	0,063	0,911	0,260
0,92	0,055	1,000	0,078	0,910	0,278
0,91	0,060	1,000	0,095	0,907	0,296
0,90	0,066	1,000	0,112	0,905	0,314

mento de Copenhagen do modelo C-ADF e RL-ADF.

Observando a Tab. 5.15 e a Tab. 5.16, nota-se que a única diferença significativa entre os modelos C-ADF e RL-ADF, para $\alpha = 0,99$ é que, enquanto o C-ADF apresenta uma tendência a subestimar os dados ($FB = -0,001$), o RL-ADF apresenta o oposto ($FB = 0,004$), uma tendência a superestimá-los, ainda que, em ambos os casos, de formas bem leves. Na Tab. 5.17 estão os índices estatísticos do modelo C-ADF para diferentes distâncias da fonte nas simulações do experimento de Copenhagen.

Como pode-se observar na Tab. 5.17, o desempenho do modelo para os valores de α considerados, praticamente, não se altera na predição das concentrações registradas de 1900 a 2100 metros da fonte, mas ainda assim o menor valor do NMSE foi de 0,024 para $\alpha = 0,97$. Para

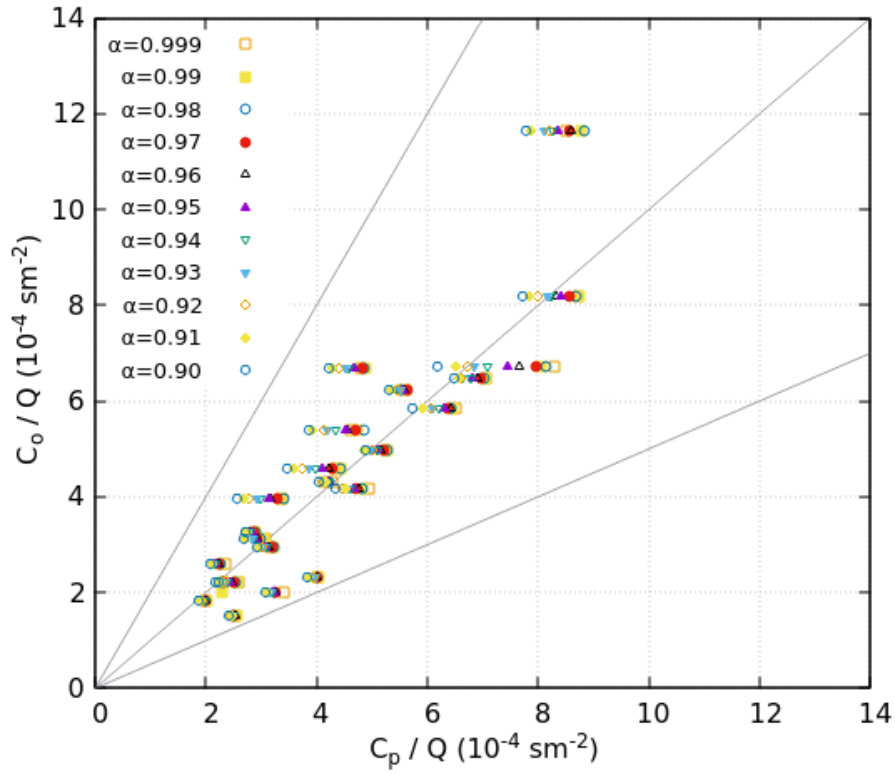


Figura 5.17: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.

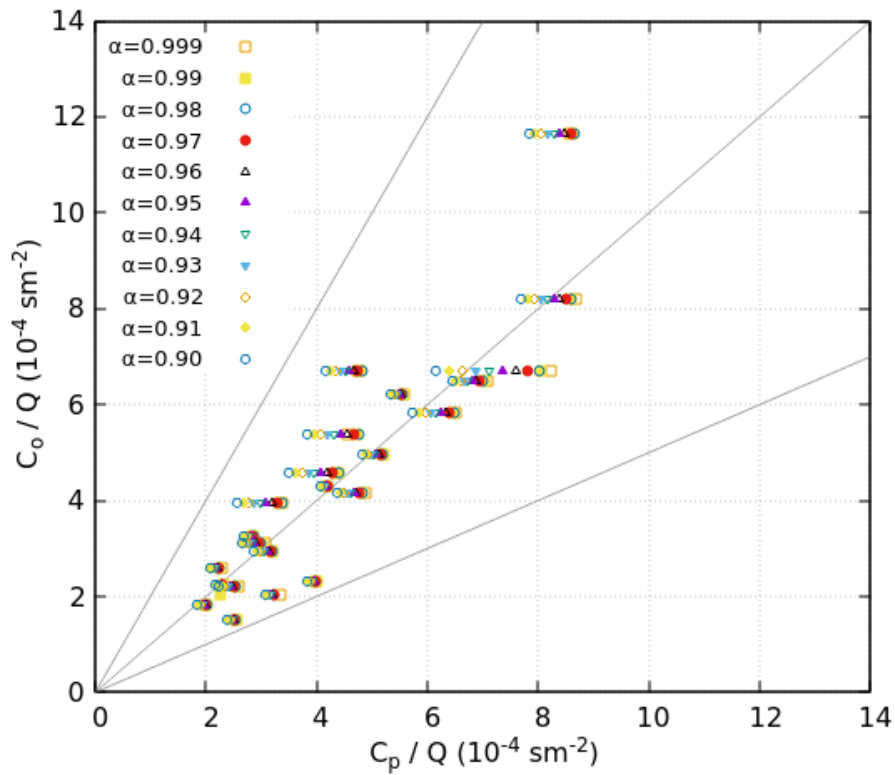


Figura 5.18: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.

Tabela 5.17: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Copenhagen, a diferentes distâncias da fonte.

Distância (m)	α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	—	0	1	0	1	0
1900 a 2100	0,999	0,030	1,000	0,002	0,838	-0,280
	0,99	0,025	1,000	0,003	0,862	-0,260
	0,98	0,025	1,000	0,000	0,856	-0,249
	0,97	0,024	1,000	0,020	0,862	-0,244
	0,96	0,026	1,000	0,043	0,853	-0,210
	0,95	0,025	1,000	0,054	0,868	-0,211
	0,94	0,028	1,000	0,080	0,868	-0,194
	0,93	0,031	1,000	0,102	0,871	-0,186
	0,92	0,036	1,000	0,124	0,868	-0,181
	0,91	0,044	1,000	0,145	0,853	-0,173
	0,90	0,051	1,000	0,172	0,862	-0,155
3600 a 4200	0,999	0,072	1,000	-0,003	0,937	0,427
	0,99	0,056	1,000	0,020	0,951	0,356
	0,98	0,060	1,000	0,000	0,950	0,388
	0,97	0,068	1,000	0,008	0,942	0,413
	0,96	0,067	1,000	0,010	0,940	0,400
	0,95	0,074	1,000	0,025	0,939	0,432
	0,94	0,078	1,000	0,036	0,938	0,446
	0,93	0,083	1,000	0,047	0,935	0,460
	0,92	0,080	1,000	0,054	0,938	0,443
	0,91	0,093	1,000	0,074	0,936	0,492
	0,90	0,097	1,000	0,088	0,938	0,507
5300 a 6100	0,999	0,019	1,000	-0,068	0,952	0,060
	0,99	0,021	1,000	-0,060	0,940	0,065
	0,98	0,019	1,000	-0,063	0,949	0,049
	0,97	0,020	1,000	-0,054	0,944	0,073
	0,96	0,047	1,000	0,013	0,939	0,241
	0,95	0,018	1,000	-0,042	0,948	0,080
	0,94	0,020	1,000	-0,043	0,942	0,081
	0,93	0,019	1,000	-0,023	0,942	0,107
	0,92	0,019	1,000	-0,020	0,942	0,102
	0,91	0,019	1,000	-0,016	0,942	0,122
	0,90	0,019	1,000	-0,001	0,944	0,123

as distâncias de 3600 a 4200 metros, por outro lado, o menor valor do NMSE foi de 0,056 para $\alpha = 0,99$ e, para as distâncias de 5300 a 6100 metros, de 0,018 para $\alpha = 0,95$, ainda que, nesse último caso, os desempenhos dos modelos tenham sido muito parecidos independentemente do valor de α considerado.

Em relação à fração de inclinação (FB), nota-se a leve tendência do modelo de subestimar as concentrações experimentais registradas de 1900 a 4200 metros de distância da fonte para praticamente todos os valores de α , algo que se inverte para as concentrações registradas acima

de 5300 metros. Em relação ao desvio fracional padrão (FS), por outro lado, verifica-se que, para as concentrações registradas até 2100 metros de distância da fonte, tem-se que os valores simulados revelaram-se mais dispersos do que os valores experimentais, uma vez que $FS < 0$ indica que o desvio padrão das concentrações preditas é maior do que o desvio padrão das concentrações observadas nos experimentos, comportamento que também se inverte para as concentrações registradas a partir de 3600 metros de distância da fonte. Convém ressaltar também que, como pode-se verificar na Tab. 5.17, os dados preditos e experimentais estão muito bem correlacionados, com CC variando: de 83,8% a 87,1%, para as concentrações registradas de 1900 a 2100 metros; de 93,5% a 95,1%, para as concentrações registradas de 3600 a 4200 metros; e de 93,9% a 95,2%, para as concentrações registradas de 5300 a 6100 metros.

Na Tab. 5.18 e na Tab. 5.19 são apresentados, respectivamente, os resultados obtidos pelo modelo C-ADF e RL-ADF nas simulações dos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis. Em termos de NMSE, pode-se observar que o melhor valor registrado pelo modelo C-ADF foi de 0,054 e pelo modelo RL-ADF foi de 0,053, ambos para $\alpha = 0,95$. Também fica evidente a tendência de ambos os modelos de superestimarem as concentrações experimentais para $0,93 \leq \alpha < 1$ e de subestimarem as concentrações para $0,90 \leq \alpha \leq 0,92$, dentro do intervalo de valores considerados para α .

Na Fig. 5.19 e na Fig. 5.20, por sua vez, podem ser vistas as comparações entre os resultados numéricos e os dados experimentais. Analisando as Tabs. 5.18–5.19 e as Figs. 5.19–5.20 constata-se que os desempenhos dos modelos C-ADF e RL-ADF são muito parecidos. Em ambos os casos, pode-se verificar que os melhores valores dos índices de modo geral foram registrados para $0,92 \leq \alpha \leq 0,96$, quando observou-se cerca de 75% a 83% dos dados dentro de um fator de dois (FA2). Para fins de comparação, quando $\alpha \approx 1$, tanto com o modelo C-ADF quanto com o modelo RL-ADF, a quantidade de dados dentro do FA2 foi menor do que 70%.

Tabela 5.18: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,095	0,632	-0,322	0,965	-0,101
0,99	0,075	0,684	-0,283	0,970	-0,074
0,98	0,065	0,716	-0,245	0,967	-0,009
0,97	0,060	0,716	-0,208	0,963	0,031
0,96	0,059	0,758	-0,179	0,958	0,057
0,95	0,054	0,789	-0,127	0,958	0,111
0,94	0,062	0,821	-0,085	0,950	0,143
0,93	0,068	0,821	-0,036	0,948	0,189
0,92	0,085	0,832	0,017	0,938	0,216
0,91	0,113	0,842	0,097	0,930	0,278
0,90	0,158	0,789	0,172	0,916	0,331

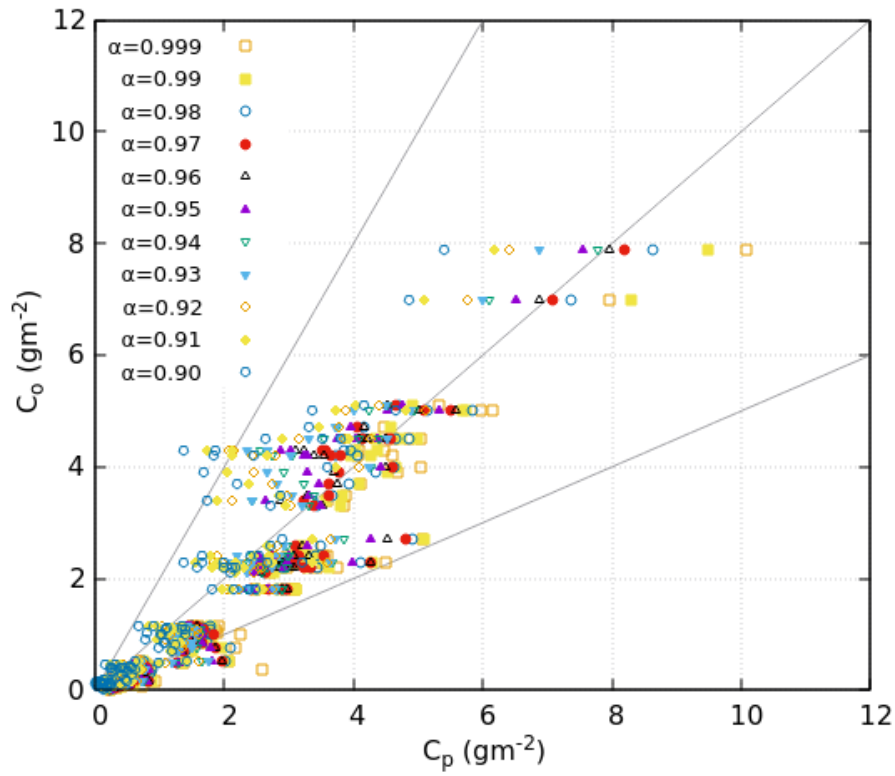


Figura 5.19: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

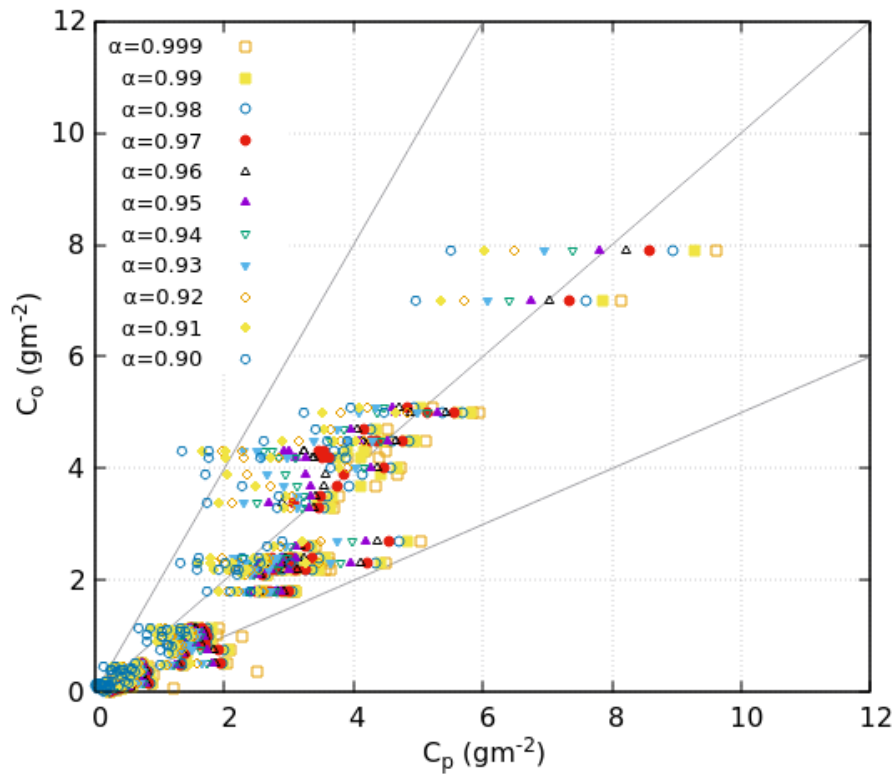


Figura 5.20: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

Tabela 5.19: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,093	0,674	-0,318	0,965	-0,086
0,99	0,072	0,716	-0,272	0,969	-0,054
0,98	0,064	0,716	-0,243	0,967	-0,019
0,97	0,058	0,737	-0,210	0,965	0,019
0,96	0,054	0,747	-0,172	0,962	0,059
0,95	0,053	0,768	-0,130	0,959	0,101
0,94	0,058	0,821	-0,083	0,954	0,144
0,93	0,068	0,842	-0,030	0,948	0,190
0,92	0,086	0,832	0,031	0,941	0,237
0,91	0,115	0,832	0,099	0,931	0,284
0,90	0,158	0,789	0,177	0,918	0,333

É interessante ainda destacar que, em relação ao coeficiente de correlação (CC), os melhores índices foram de 97% no caso do modelo C-ADF e de 96,9% no caso do modelo RL-ADF, ambos obtidos com $\alpha = 0,99$. Os melhores índices do desvio fracional padrão (FS), por outro lado, foram obtidos com $\alpha = 0,97$ e $\alpha = 0,98$ no caso do modelo RL-ADF, e com $\alpha = 0,98$, no caso do modelo C-ADF.

Na Tab. 5.20 são apresentados os índices estatísticos do modelo C-ADF obtidos nas simulações dos experimentos instáveis de Prairie-Grass, separados por distâncias em relação à fonte. Pode-se observar que as concentrações mais próximas da fonte (de 50 a 200 metros) apresentaram NMSE de 0,050 (para $\alpha = 0,95$) a 0,158 (para $\alpha = 0,90$), tendo-se o valor de 0,082 para $\alpha \approx 1$. As concentrações mais distantes da fonte (de 400 a 800 metros), por outro lado, apresentaram NMSE de 0,271 (para $\alpha = 0,90$) a 1,433 (para $\alpha \approx 1$).

Convém ressaltar também o comportamento do modelo em relação à tendência de superestimar as concentrações mais distantes da fonte para todos os valores de α considerados. No caso das concentrações mais próximas à fonte, esse comportamento também se observa, porém apenas para valores de $\alpha \geq 0,94$, uma vez que para valores de $\alpha < 0,94$ o que se observa é uma tendência à subestimação das concentrações experimentais.

Na Tab. 5.21 e na Tab. 5.22 estão, respectivamente, os índices estatísticos dos modelos C-ADF e RL-ADF obtidos nas simulações dos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições de atmosfera estável. Como pode-se observar, os desempenhos alcançados por ambos os modelos são muito parecidos. Cabe destacar ainda que, em relação a esses desempenhos, foram obtidos melhores valores de NMSE para $0,90 \leq \alpha \leq 0,99$ do que para $\alpha \approx 1$, assim como há uma maior quantidade de dados dentro de um fator de dois (FA2) para $0,95 \leq \alpha \leq 0,99$ do que para $\alpha \approx 1$. Em termos de FB, verificou-se ainda uma tendência à subestimação para $\alpha \geq 0,95$ e uma tendência à superestimação para $\alpha < 0,95$. Na Fig. 5.21 e na Fig. 5.22 são apresentados os gráficos de espalhamento dos experimentos de Prairie-Grass realizados sob

Tabela 5.20: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Instáveis) para diferentes distâncias da fonte.

Distância (m)	α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	—	0	1	0	1	0
50 a 200	0,999	0,082	0,877	-0,271	0,950	-0,017
	0,99	0,069	0,912	-0,242	0,951	0,017
	0,98	0,059	0,947	-0,201	0,948	0,106
	0,97	0,055	0,947	-0,164	0,940	0,149
	0,96	0,054	0,947	-0,136	0,931	0,176
	0,95	0,050	0,947	-0,083	0,931	0,228
	0,94	0,059	0,947	-0,043	0,913	0,256
	0,93	0,065	0,965	0,003	0,910	0,306
	0,92	0,083	0,947	0,053	0,888	0,315
	0,91	0,112	0,930	0,129	0,874	0,371
	0,90	0,158	0,895	0,197	0,846	0,422
400 a 800	0,999	1,433	0,263	-0,875	0,578	-0,937
	0,99	0,690	0,342	-0,768	0,823	-0,444
	0,98	0,669	0,368	-0,755	0,821	-0,445
	0,97	0,609	0,368	-0,721	0,814	-0,399
	0,96	0,553	0,474	-0,686	0,812	-0,371
	0,95	0,498	0,553	-0,644	0,801	-0,342
	0,94	0,440	0,632	-0,591	0,785	-0,322
	0,93	0,391	0,605	-0,525	0,746	-0,294
	0,92	0,319	0,658	-0,443	0,744	-0,262
	0,91	0,278	0,711	-0,321	0,699	-0,247
	0,90	0,271	0,632	-0,175	0,644	-0,215

condições atmosféricas estáveis, onde se pode observar que de fato grande parte das concentrações preditas estão dentro de um fator de dois das concentrações observacionais.

Na Tab. 5.23 estão os índices estatísticos do modelo C-ADF obtidos nas simulações de Prairie-Grass (Condições Estáveis) para diferentes distâncias da fonte. Como se pode observar, para as concentrações registradas nas distâncias de 50 e 200 metros, os valores de $0,90 \leq \alpha \leq 0,99$ forneceram NMSE menores do que o valor de $\alpha \approx 1$, algo que se inverteu nas concentrações registradas na distância de 800 metros, tendo, nesse último caso, apenas o valor de $\alpha = 0,99$ atingido um NMSE menor do que aquele obtido empregando $\alpha \approx 1$.

Os resultados obtidos pelos modelos C-ADF e RL-ADF nas simulações do experimento de Hanford estão apresentados, respectivamente, na Tab. 5.24 e na Tab. 5.25. Novamente, pode-se observar que ambos os modelos apresentaram desempenhos muito parecidos, tendo sido registrados os menores valores de NMSE para $0,90 \leq \alpha \leq 0,99$ em comparação à $\alpha \approx 1$, de modo que é possível afirmar então que a consideração de ordens menores do que 1 no modelo levou, portanto, a melhores resultados. Não obstante, a quantidade de dados dentro de um fator de dois também se mostrou maior para os valores de $\alpha \leq 0,99$, comparativamente ao valor de $\alpha \approx 1$.

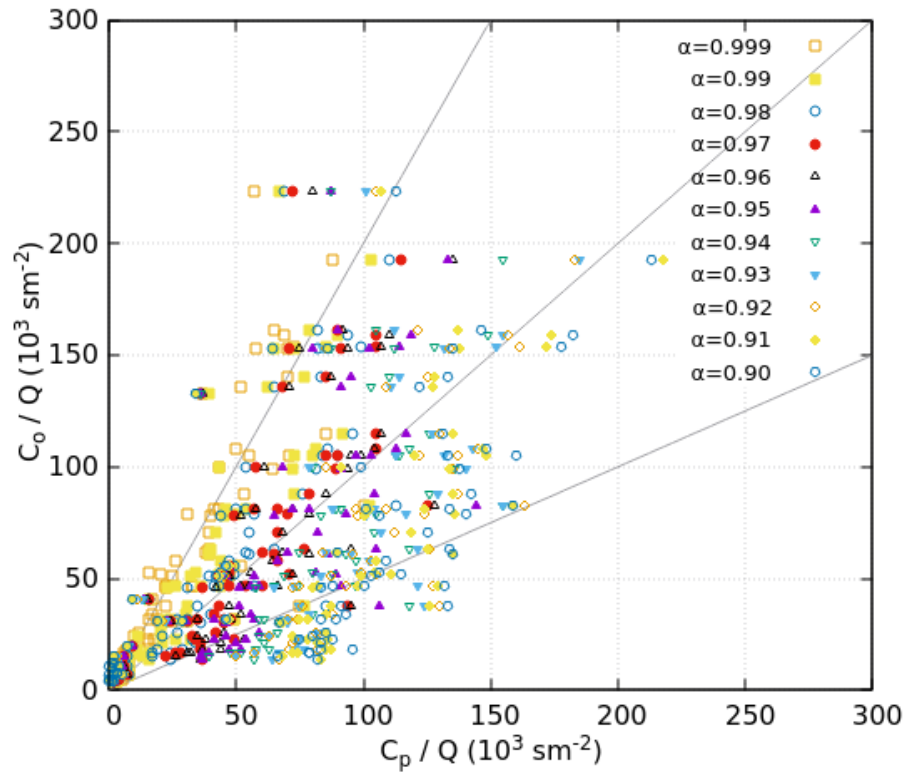


Figura 5.21: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

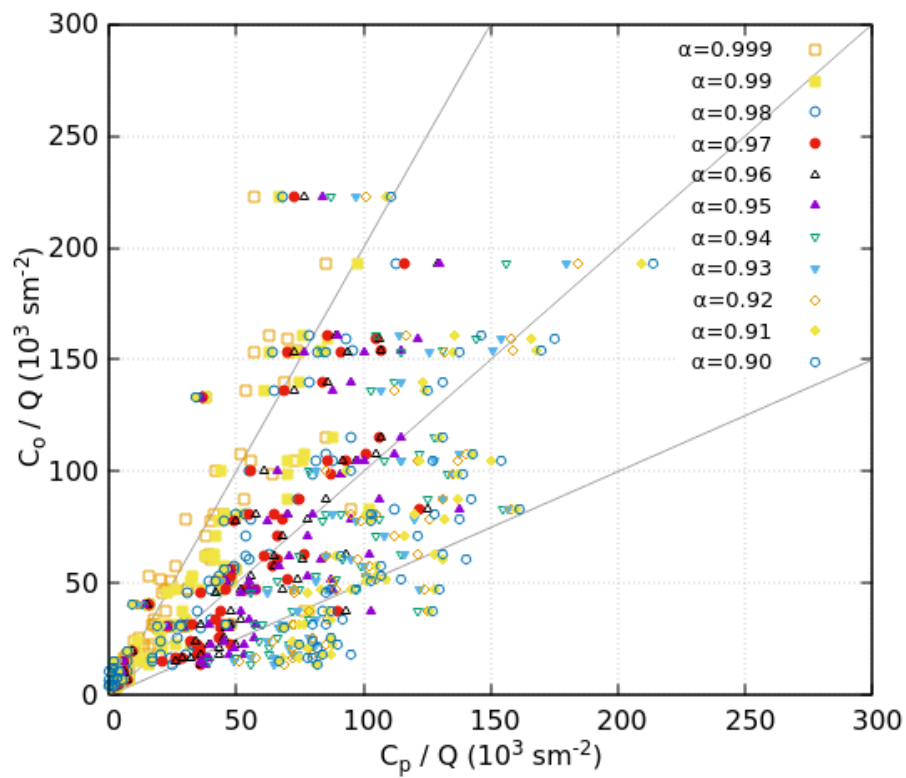


Figura 5.22: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

Tabela 5.21: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,646	0,587	0,601	0,835	0,689
0,99	0,415	0,760	0,442	0,860	0,580
0,98	0,330	0,787	0,310	0,833	0,517
0,97	0,276	0,733	0,189	0,802	0,432
0,96	0,242	0,680	0,127	0,800	0,370
0,95	0,232	0,627	0,023	0,770	0,282
0,94	0,245	0,533	-0,130	0,740	0,136
0,93	0,266	0,493	-0,218	0,733	0,044
0,92	0,275	0,467	-0,247	0,734	0,009
0,91	0,304	0,453	-0,311	0,732	-0,059
0,90	0,327	0,427	-0,340	0,724	-0,089

Tabela 5.22: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,650	0,560	0,606	0,837	0,691
0,99	0,442	0,733	0,458	0,856	0,603
0,98	0,338	0,760	0,319	0,834	0,530
0,97	0,277	0,733	0,199	0,808	0,440
0,96	0,252	0,693	0,139	0,798	0,389
0,95	0,237	0,613	0,036	0,770	0,296
0,94	0,244	0,533	-0,125	0,741	0,136
0,93	0,265	0,507	-0,209	0,732	0,053
0,92	0,274	0,480	-0,241	0,731	0,022
0,91	0,303	0,440	-0,301	0,728	-0,044
0,90	0,322	0,413	-0,331	0,723	-0,076

Na Fig. 5.23 e na Fig. 5.24 estão as comparações entre os resultados numéricos e observacionais do experimento de Hanford. Nas imagens, assim como na Tab. 5.24 e na Tab. 5.25, percebe-se claramente a forte tendência dos modelos de subestimar as concentrações experimentais, sendo o maior valor de FB registrado para $\alpha \approx 1$ e o mais próximo de zero (valor ideal), registrado para $\alpha = 0,90$, tanto com o modelo C-ADF quanto com o modelo RL-ADF. Na Tab. 5.26, por sua vez, estão os índices estatísticos do modelo C-ADF para diferentes distâncias da fonte. Como pode-se observar, tanto nas concentrações mais próximas da fonte quanto nas mais distantes, ao se utilizar valores de $0,90 \leq \alpha \leq 0,99$ nos modelos, os resultados obtidos foram melhores do que os registrados utilizando-se $\alpha = 0,999$, em praticamente todos os itens analisados (NMSE, FA2, FB e FS).

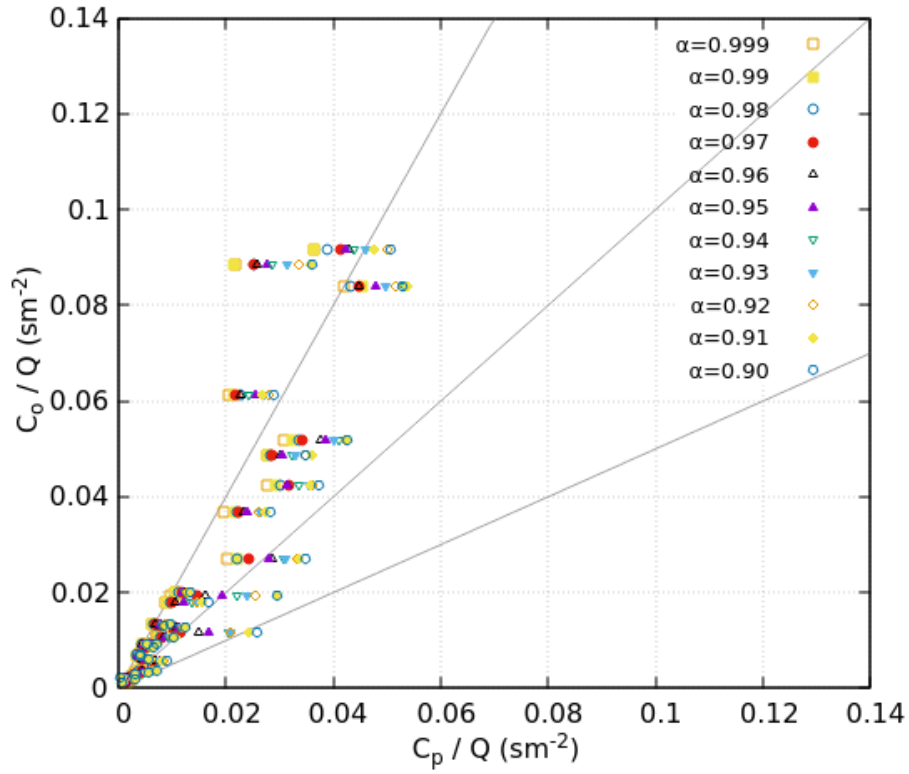


Figura 5.23: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.

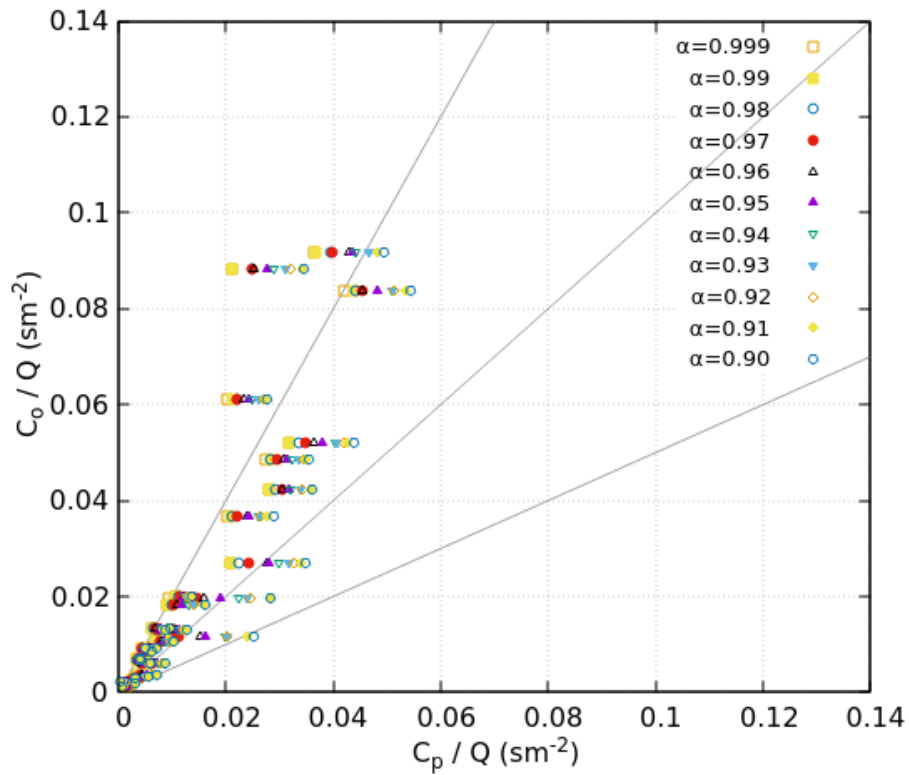


Figura 5.24: Comparação entre os resultados numéricos do modelo bidimensional RL-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Hanford.

Tabela 5.23: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento Prairie-Grass (Condições Estáveis), a diferentes distâncias da fonte.

Distância (m)	α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	—	0	1	0	1	0
50m	0,999	0,614	0,520	0,649	0,768	0,806
	0,99	0,339	0,840	0,458	0,813	0,727
	0,98	0,254	0,880	0,332	0,748	0,780
	0,97	0,193	0,920	0,214	0,692	0,790
	0,96	0,161	0,920	0,146	0,675	0,735
	0,95	0,151	0,960	0,035	0,579	0,802
	0,94	0,133	0,920	-0,114	0,605	0,644
	0,93	0,152	0,880	-0,201	0,581	0,535
	0,92	0,163	0,840	-0,233	0,580	0,533
	0,91	0,174	0,800	-0,294	0,642	0,392
	0,90	0,194	0,720	-0,324	0,622	0,399
200m	0,999	0,698	0,520	0,599	0,772	0,628
	0,99	0,521	0,800	0,417	0,776	0,626
	0,98	0,417	0,960	0,220	0,751	0,641
	0,97	0,373	0,840	0,050	0,712	0,646
	0,96	0,336	0,760	-0,025	0,729	0,634
	0,95	0,326	0,600	-0,148	0,715	0,607
	0,94	0,418	0,440	-0,340	0,635	0,637
	0,93	0,441	0,360	-0,444	0,681	0,646
	0,92	0,448	0,320	-0,473	0,688	0,599
	0,91	0,523	0,320	-0,547	0,676	0,657
	0,90	0,554	0,320	-0,581	0,675	0,646
800m	0,999	0,686	0,720	0,411	0,725	0,529
	0,99	0,676	0,640	0,434	0,742	0,538
	0,98	0,731	0,520	0,459	0,726	0,548
	0,97	0,758	0,440	0,494	0,725	0,544
	0,96	0,749	0,360	0,510	0,732	0,535
	0,95	0,787	0,320	0,548	0,734	0,553
	0,94	0,837	0,240	0,597	0,731	0,557
	0,93	0,912	0,240	0,635	0,719	0,574
	0,92	0,928	0,240	0,650	0,719	0,575
	0,91	0,950	0,240	0,668	0,706	0,546
	0,90	0,972	0,240	0,698	0,715	0,562

É interessante mencionar também que, como pode-se observar na Tab. 5.26, para todos os valores de α considerados, a tendência à subestimação se mostrou maior nas concentrações registradas de 100 a 800 metros da fonte do que de 1600 a 3200 metros da fonte.

Tabela 5.24: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento de Hanford.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,770	0,733	0,668	0,918	0,819
0,99	0,709	0,733	0,627	0,906	0,782
0,98	0,633	0,800	0,591	0,925	0,765
0,97	0,590	0,900	0,559	0,917	0,736
0,96	0,539	0,833	0,511	0,902	0,696
0,95	0,486	0,900	0,469	0,907	0,676
0,94	0,422	0,867	0,406	0,889	0,608
0,93	0,389	0,900	0,382	0,902	0,605
0,92	0,332	0,900	0,345	0,908	0,552
0,91	0,329	0,867	0,318	0,894	0,542
0,90	0,307	0,867	0,295	0,896	0,523

Tabela 5.25: Índices estatísticos do Modelo bidimensional RL-ADF nas simulações do experimento de Hanford.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,770	0,700	0,669	0,913	0,811
0,99	0,730	0,733	0,641	0,911	0,796
0,98	0,635	0,800	0,596	0,925	0,761
0,97	0,601	0,833	0,565	0,914	0,738
0,96	0,540	0,867	0,515	0,906	0,700
0,95	0,480	0,900	0,473	0,909	0,668
0,94	0,432	0,867	0,419	0,896	0,624
0,93	0,384	0,900	0,384	0,902	0,594
0,92	0,361	0,900	0,367	0,904	0,575
0,91	0,335	0,867	0,324	0,894	0,546
0,90	0,318	0,867	0,304	0,891	0,525

5.4 Modelo 3D com derivadas fracionárias nos termos advectivo e difusivo

Em razão dos modelos bidimensionais com derivadas fracionárias de Caputo e de Riemann-Liouville terem apresentado desempenhos muito parecidos, no modelo tridimensional são consideradas somente as derivadas de Caputo em todos os termos da equação, de modo que o único modelo aqui avaliado é, portanto, o C-ADF (baseado na Equação da Advecção-Difusão Fracionária com derivadas de Caputo).

Na Tab. 5.27 estão os índices estatísticos obtidos nas simulações do experimento de Copenhagen. Como pode-se observar, o desempenho do modelo no quesito NMSE praticamente não se alterou para $0,95 \leq \alpha \leq 0,999$, algo que também verificou-se para o FA2, ainda que para

Tabela 5.26: Índices estatísticos do Modelo bidimensional C-ADF nas simulações do experimento de Hanford, a diferentes distâncias da fonte.

Distância (m)	α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	—	0	1	0	1	0
100 a 800	0,999	0,779	0,667	0,694	0,879	0,855
	0,99	0,716	0,722	0,649	0,860	0,826
	0,98	0,639	0,778	0,612	0,890	0,824
	0,97	0,596	0,833	0,578	0,878	0,800
	0,96	0,544	0,833	0,525	0,856	0,778
	0,95	0,491	0,833	0,481	0,866	0,776
	0,94	0,426	0,833	0,414	0,837	0,714
	0,93	0,392	0,889	0,391	0,862	0,725
	0,92	0,334	0,889	0,350	0,870	0,669
	0,91	0,332	0,833	0,323	0,850	0,673
	0,90	0,309	0,833	0,297	0,855	0,666
1600 a 3200	0,999	0,352	0,833	0,456	0,937	0,800
	0,99	0,340	0,750	0,446	0,931	0,784
	0,98	0,328	0,833	0,421	0,895	0,762
	0,97	0,280	1,000	0,399	0,929	0,712
	0,96	0,281	0,833	0,397	0,895	0,659
	0,95	0,243	1,000	0,365	0,895	0,601
	0,94	0,219	0,917	0,336	0,875	0,531
	0,93	0,194	0,917	0,304	0,864	0,470
	0,92	0,189	0,917	0,302	0,865	0,449
	0,91	0,167	0,917	0,273	0,859	0,389
	0,90	0,181	0,917	0,278	0,842	0,401

$\alpha \approx 1$ o valor do índice tenha ficado um pouco abaixo dos demais. Além disso, também convém ressaltar que, para $0,97 \leq \alpha \leq 0,999$, o modelo apresentou uma leve tendência a superestimar as concentrações, enquanto que, para $\alpha \leq 0,96$, essa tendência se mostrou contrária, sendo que o melhor valor de FB registrado foi 0,01 para $\alpha = 0,96$. Na Fig. 5.25 é apresentada a comparação entre os resultados numéricos e os experimentais.

Pode-se observar na Fig. 5.25 que a maior parte dos resultados realmente encontra-se dentro de um fator de dois. Nas Tabs. 5.28–5.30, por sua vez, podem ser vistos os índices estatísticos calculados para diferentes distâncias em relação à fonte. Como pode-se observar, para as distâncias de 1900 a 2100 metros em relação à fonte o valor de $\alpha \approx 1$ foi o que forneceu o menor NMSE com $\text{FA2} = 100\%$. No caso das distâncias de 3600 a 4200 metros, por sua vez, foi o valor de $\alpha = 0,97$ que forneceu o menor valor do NMSE, com $\text{FA2} = 88,9\%$. Finalmente, nas distâncias de 5300 a 6100 metros, também foi o valor de $\alpha = 0,97$ que forneceu o menor NMSE, porém agora com $\text{FA2} = 66,7\%$.

Na Fig. 5.26 podem ser observados os resultados numéricos do modelo tridimensional confrontados com as concentrações máximas observadas nos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis e, na Tab. 5.31, podem ser analisados os índices

Tabela 5.27: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhagen.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,155	0,783	-0,094	0,770	0,276
0,99	0,154	0,826	-0,076	0,770	0,276
0,98	0,153	0,870	-0,054	0,774	0,285
0,97	0,152	0,870	-0,022	0,778	0,286
0,96	0,155	0,870	0,001	0,777	0,278
0,95	0,158	0,870	0,016	0,776	0,280
0,94	0,161	0,913	0,044	0,778	0,278
0,93	0,165	0,870	0,069	0,780	0,283
0,92	0,173	0,826	0,097	0,779	0,282
0,91	0,184	0,826	0,143	0,783	0,278
0,90	0,207	0,826	0,207	0,786	0,289
0,89	0,221	0,826	0,240	0,786	0,285
0,88	0,249	0,826	0,299	0,791	0,294
0,87	0,276	0,783	0,337	0,784	0,287
0,86	0,311	0,739	0,391	0,786	0,292
0,85	0,367	0,565	0,465	0,787	0,300

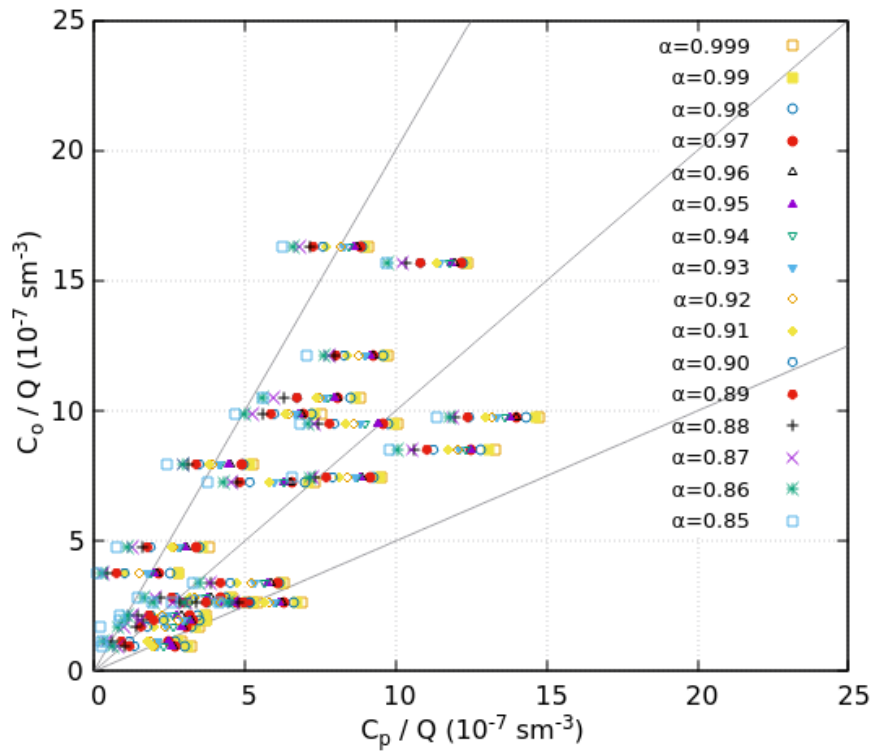


Figura 5.25: Comparação entre os resultados numéricos do modelo tridimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Copenhagen.

estatísticos alcançados nas referidas simulações. Como pode-se perceber, todos os valores de

Tabela 5.28: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhague, de 1900m a 2100m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,138	1,000	0,014	-0,273	0,121
0,99	0,140	1,000	0,026	-0,272	0,116
0,98	0,139	1,000	0,045	-0,257	0,146
0,97	0,143	1,000	0,069	-0,251	0,157
0,96	0,145	1,000	0,078	-0,235	0,147
0,95	0,148	1,000	0,087	-0,245	0,152
0,94	0,154	1,000	0,107	-0,245	0,155
0,93	0,157	1,000	0,120	-0,253	0,185
0,92	0,164	1,000	0,138	-0,241	0,176
0,91	0,181	0,875	0,169	-0,271	0,184
0,90	0,195	0,875	0,209	-0,242	0,208
0,89	0,210	0,875	0,229	-0,258	0,206
0,88	0,226	0,875	0,265	-0,213	0,226
0,87	0,251	0,875	0,287	-0,241	0,191
0,86	0,276	0,875	0,317	-0,231	0,183
0,85	0,319	0,750	0,366	-0,241	0,205

$\alpha \leq 0,9$ atingiram melhores valores de NMSE, FB e FS do que no caso de $\alpha \approx 1$. Com a exceção dos valores de α iguais a 0,99, 0,86 e 0,85, pode-se verificar que o mesmo ocorreu para o FA2, de modo que é possível concluir que a consideração de ordens menores nas derivadas da equação levaram a um melhor desempenho do modelo. Tem-se, para $0,87 \leq \alpha \leq 0,98$, mais de 60% dos resultados obtidos dentro de um fator de dois, sendo o melhor FA2 igual a 68,4%, alcançado pelo modelo com $\alpha = 0,93$.

Os índices estatísticos do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) obtidos pelo modelo C-ADF tridimensional para diferentes distâncias em relação à fonte estão apresentados na Tab. 5.32 e na Tab. 5.33. Como pode-se observar, no caso das concentrações mais próximas da fonte, o modelo com $\alpha \leq 0,99$ se mostrou melhor do que o modelo com $\alpha = 0,999$ em praticamente todos os índices avaliados, fato que se inverteu para as concentrações mais distantes da fonte.

Os resultados obtidos nas simulações tridimensionais dos experimentos de Prairie-Grass para diferentes distâncias da fonte evidenciam a tendência do modelo de superestimar as concentrações, de forma menos acentuada naquelas registradas de 50 a 200 metros de distância da fonte e, de forma mais acentuada, nas registradas de 400 a 800 metros. Nas concentrações mais próximas da fonte, chega-se a ter 98,2% dos dados dentro de um fator de dois.

Na Fig. 5.27 e na Tab. 5.34 também são apresentados os resultados obtidos pelo modelo tridimensional nas simulações do experimento de Prairie-Grass, porém sob condições estáveis.

Como pode-se observar na Tab. 5.34, o modelo com $0,96 \leq \alpha \leq 0,99$ apresentou um desempenho melhor do que o modelo com $\alpha \approx 1$ nos quesitos NMSE, FA2, FB e FS. Em

Tabela 5.29: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhagen, de 3600m a 4200m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,173	0,778	-0,191	0,868	0,559
0,99	0,165	0,778	-0,171	0,873	0,552
0,98	0,165	0,889	-0,151	0,867	0,548
0,97	0,156	0,889	-0,122	0,874	0,537
0,96	0,159	0,889	-0,084	0,861	0,525
0,95	0,158	0,889	-0,059	0,862	0,524
0,94	0,159	0,889	-0,036	0,860	0,512
0,93	0,167	0,889	-0,001	0,855	0,524
0,92	0,172	0,778	0,030	0,854	0,522
0,91	0,163	0,778	0,080	0,871	0,485
0,90	0,196	0,889	0,150	0,865	0,525
0,89	0,201	0,889	0,180	0,874	0,523
0,88	0,239	0,889	0,249	0,868	0,534
0,87	0,256	0,889	0,289	0,870	0,529
0,86	0,300	0,889	0,360	0,874	0,545
0,85	0,355	0,778	0,441	0,868	0,529

Tabela 5.30: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Copenhagen, de 5300m a 6100m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,326	0,500	-0,324	0,275	1,137
0,99	0,323	0,667	-0,294	0,213	1,176
0,98	0,316	0,667	-0,247	0,166	1,158
0,97	0,303	0,667	-0,176	0,189	1,034
0,96	0,335	0,667	-0,134	-0,001	1,136
0,95	0,346	0,667	-0,117	-0,045	1,121
0,94	0,327	0,833	-0,038	0,122	1,071
0,93	0,327	0,667	0,018	0,194	1,078
0,92	0,383	0,667	0,086	0,101	1,028
0,91	0,481	0,833	0,205	0,071	0,962
0,90	0,686	0,667	0,407	0,111	1,018
0,89	0,880	0,667	0,547	0,172	1,025
0,88	1,313	0,667	0,733	0,140	1,005
0,87	1,849	0,500	0,902	0,140	1,040
0,86	2,611	0,333	1,098	0,265	1,231
0,85	5,002	0,000	1,407	0,326	1,301

relação ao coeficiente de correlação (CC), convém destacar que, para todos os valores de α , obteve-se $56,2\% \leq CC \leq 57,8\%$. Na Fig. 5.27, por sua vez, é possível verificar que, embora

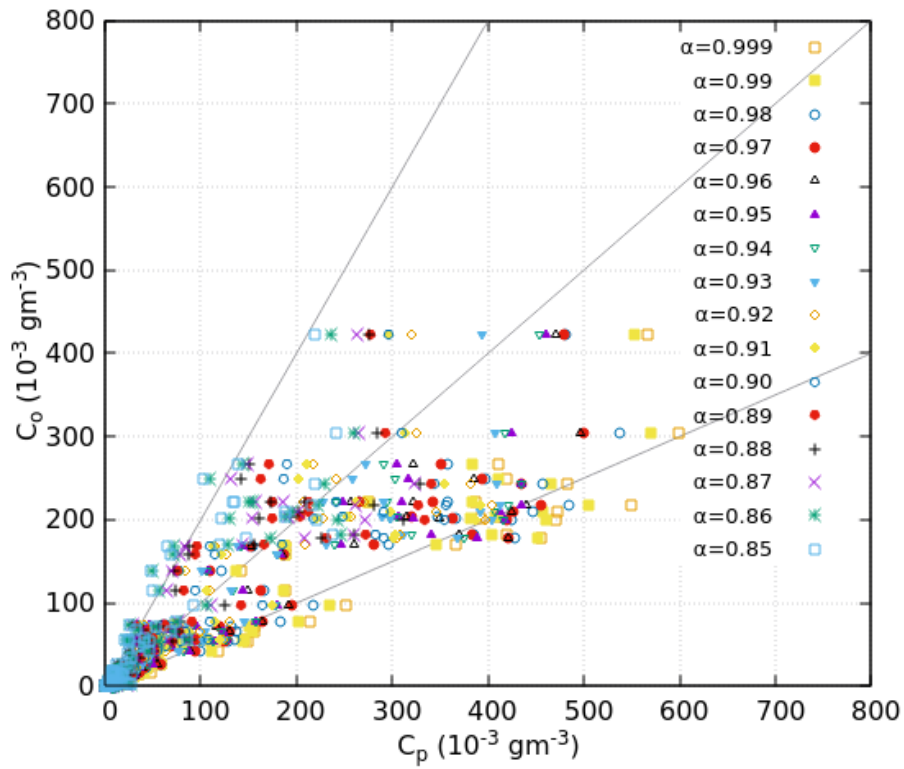


Figura 5.26: Comparação entre os resultados numéricos do modelo tridimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

Tabela 5.31: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,460	0,579	-0,584	0,956	-0,597
0,99	0,413	0,568	-0,555	0,958	-0,565
0,98	0,340	0,611	-0,488	0,953	-0,501
0,97	0,297	0,642	-0,453	0,956	-0,467
0,96	0,278	0,642	-0,429	0,953	-0,445
0,95	0,230	0,653	-0,377	0,952	-0,391
0,94	0,212	0,663	-0,349	0,951	-0,368
0,93	0,191	0,684	-0,304	0,942	-0,320
0,92	0,161	0,674	-0,190	0,920	-0,207
0,91	0,151	0,653	-0,133	0,914	-0,152
0,90	0,128	0,663	-0,087	0,920	-0,101
0,89	0,121	0,642	0,018	0,918	0,004
0,88	0,123	0,642	0,073	0,920	0,064
0,87	0,132	0,600	0,121	0,920	0,121
0,86	0,175	0,474	0,223	0,922	0,246
0,85	0,220	0,432	0,281	0,917	0,311

Tabela 5.32: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis), de 50m a 200m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,460	0,596	-0,583	0,940	-0,603
0,99	0,412	0,614	-0,553	0,943	-0,570
0,98	0,339	0,702	-0,484	0,935	-0,508
0,97	0,297	0,754	-0,449	0,939	-0,476
0,96	0,278	0,772	-0,424	0,936	-0,456
0,95	0,230	0,842	-0,370	0,934	-0,403
0,94	0,212	0,877	-0,341	0,933	-0,382
0,93	0,191	0,930	-0,294	0,921	-0,335
0,92	0,160	0,982	-0,174	0,893	-0,227
0,91	0,150	0,965	-0,115	0,884	-0,175
0,90	0,128	0,982	-0,066	0,893	-0,125
0,89	0,120	0,982	0,047	0,892	-0,026
0,88	0,121	0,982	0,106	0,895	0,032
0,87	0,130	0,930	0,158	0,897	0,090
0,86	0,173	0,754	0,270	0,899	0,215
0,85	0,217	0,702	0,333	0,894	0,278

Tabela 5.33: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Instáveis), de 400m a 800m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,645	0,553	-0,635	0,919	-0,764
0,99	0,695	0,500	-0,665	0,921	-0,790
0,98	0,780	0,474	-0,712	0,922	-0,827
0,97	0,841	0,474	-0,738	0,922	-0,855
0,96	0,886	0,447	-0,760	0,922	-0,872
0,95	1,022	0,368	-0,812	0,917	-0,921
0,94	1,075	0,342	-0,834	0,919	-0,940
0,93	1,204	0,316	-0,875	0,917	-0,984
0,92	1,459	0,211	-0,941	0,913	-1,062
0,91	1,593	0,184	-0,972	0,907	-1,095
0,90	1,808	0,184	-1,008	0,896	-1,147
0,89	2,231	0,132	-1,086	0,889	-1,230
0,88	2,355	0,132	-1,109	0,888	-1,250
0,87	2,516	0,105	-1,134	0,884	-1,275
0,86	2,869	0,053	-1,183	0,865	-1,318
0,85	3,054	0,026	-1,206	0,856	-1,339

os resultados sejam mais dispersos do que os verificados em outros experimentos há, mesmo assim, uma quantidade significativa de valores dentro de um fator de dois das concentrações

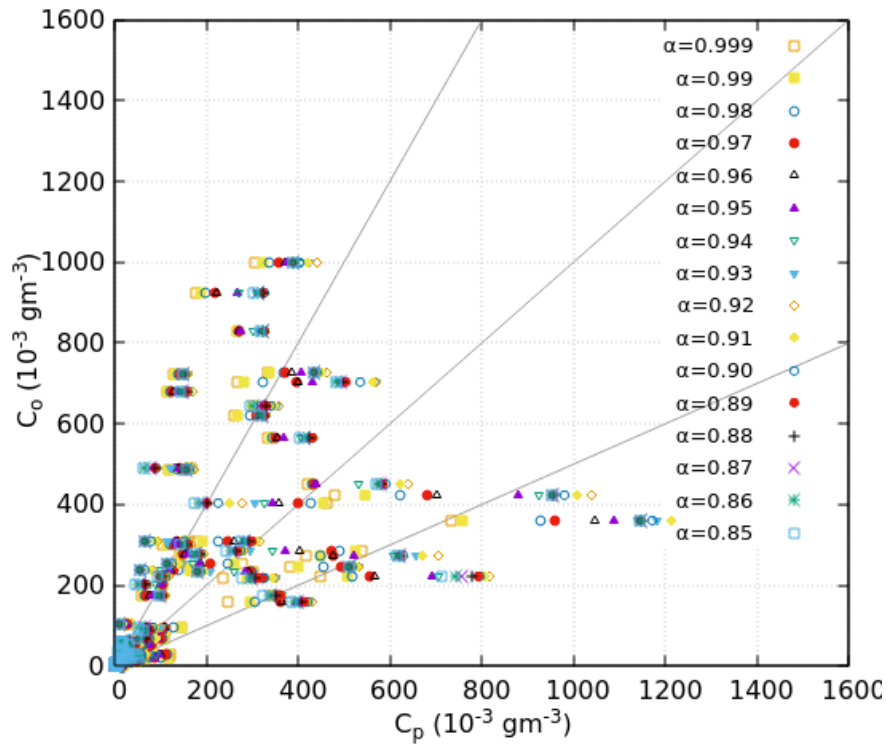


Figura 5.27: Comparação entre os resultados numéricos do modelo tridimensional C-ADF (C_p) e experimentais (C_o) do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

Tabela 5.34: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis).

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,878	0,520	0,339	0,578	0,482
0,99	0,853	0,520	0,313	0,573	0,436
0,98	0,820	0,533	0,284	0,569	0,355
0,97	0,788	0,560	0,265	0,574	0,304
0,96	0,794	0,533	0,261	0,569	0,269
0,95	0,796	0,493	0,220	0,557	0,188
0,94	0,767	0,507	0,193	0,566	0,129
0,93	0,755	0,493	0,171	0,570	0,075
0,92	0,771	0,453	0,156	0,565	0,029
0,91	0,786	0,440	0,180	0,563	0,046
0,90	0,790	0,453	0,218	0,567	0,074
0,89	0,809	0,440	0,243	0,564	0,090
0,88	0,811	0,453	0,252	0,565	0,095
0,87	0,826	0,453	0,269	0,563	0,101
0,86	0,837	0,440	0,282	0,562	0,105
0,85	0,849	0,413	0,302	0,562	0,113

observacionais. Conforme se observa na Tab. 5.34, para $\alpha = 0,94$ e $\alpha \geq 0,96$, tem-se que FA2 $> 50\%$.

Do mesmo modo que para os experimentos anteriores, para esse também foram calculados os índices estatísticos do modelo para diferentes distâncias da fonte. Esses resultados estão apresentados na Tab. 5.35 (50 metros), na Tab. 5.36 (200 metros) e na Tab. 5.37 (800 metros). Pode-se observar na Tab. 5.35 que, na simulação das concentrações mais próximas da fonte o NMSE é menor para valores de $\alpha < 0,999$ do que para $\alpha = 0,999$ e que, para as demais distâncias, como pode-se constatar nas Tabs. 5.35–5.35, isso se inverte, de forma semelhante ao ocorrido nas simulações dos experimentos instáveis de Prairie-Grass. Em termos de FB, nota-se que a tendência geral do modelo é a de subestimar as concentrações, independentemente da distância, tendo-se como exceções os modelos com $\alpha \geq 0,99$ na simulação das concentrações à 200 metros da fonte e os modelos com $\alpha \geq 0,97$ à 800 metros da fonte.

Tabela 5.35: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) à 50m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	1,005	0,400	0,518	-0,070	0,496
0,99	0,964	0,360	0,463	-0,111	0,435
0,98	0,913	0,400	0,393	-0,105	0,292
0,97	0,858	0,440	0,335	-0,111	0,239
0,96	0,857	0,440	0,303	-0,116	0,174
0,95	0,851	0,400	0,236	-0,125	0,066
0,94	0,803	0,440	0,177	-0,109	0,011
0,93	0,777	0,480	0,123	-0,102	-0,040
0,92	0,779	0,480	0,087	-0,096	-0,093
0,91	0,788	0,480	0,106	-0,099	-0,078
0,90	0,783	0,440	0,133	-0,096	-0,041
0,89	0,793	0,440	0,150	-0,102	-0,024
0,88	0,795	0,440	0,158	-0,097	-0,021
0,87	0,806	0,440	0,170	-0,094	-0,021
0,86	0,810	0,440	0,178	-0,091	-0,018
0,85	0,818	0,400	0,193	-0,082	-0,016

Embora os resultados obtidos nas simulações tridimensionais dos experimentos estáveis de Prairie-Grass não tenham sido os melhores, ainda assim pode-se observar que, ao se considerar ordens menores do que 1 nas derivadas fracionárias da equação da advecção-difusão, há uma melhoria nos índices estatísticos, ou seja, no desempenho do modelo na representação do fenômeno físico real.

Em resumo, observando-se os resultados obtidos tanto nas simulações bidimensionais quanto nas simulações tridimensionais, pode-se verificar que, independentemente do modelo empregado, da definição de derivada fracionária considerada e da condição de estabilidade atmosférica, em diversas situações, a consideração de derivadas de ordens $\alpha < 1$ nos modelos levaram a resultados estatisticamente melhores do que a consideração de $\alpha \approx 1$, tendo-se observado ainda um padrão: os modelos com derivadas fracionárias menores do que 1 somente no termo advectivo

Tabela 5.36: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) à 200m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,335	0,680	-0,069	0,711	0,029
0,99	0,343	0,640	-0,041	0,706	0,049
0,98	0,335	0,640	0,013	0,715	0,112
0,97	0,370	0,720	0,084	0,700	0,160
0,96	0,374	0,680	0,153	0,720	0,284
0,95	0,390	0,600	0,187	0,724	0,337
0,94	0,452	0,600	0,260	0,716	0,404
0,93	0,526	0,560	0,360	0,739	0,533
0,92	0,663	0,520	0,425	0,700	0,601
0,91	0,737	0,480	0,471	0,694	0,646
0,90	0,846	0,520	0,548	0,689	0,680
0,89	0,984	0,520	0,613	0,672	0,725
0,88	0,996	0,520	0,625	0,675	0,728
0,87	1,070	0,520	0,661	0,668	0,747
0,86	1,175	0,520	0,695	0,646	0,764
0,85	1,248	0,520	0,731	0,648	0,786

Tabela 5.37: Índices estatísticos do Modelo tridimensional C-ADF nas simulações do experimento de Prairie-Grass (Condições Estáveis) à 800m de distância da fonte.

α	NMSE	FA2	FB	CC	FS
Valor ótimo	0	1	0	1	0
0,999	0,590	0,480	-0,252	0,598	0,257
0,99	0,620	0,560	-0,214	0,580	0,292
0,98	0,721	0,560	-0,136	0,532	0,364
0,97	0,813	0,520	-0,047	0,503	0,437
0,96	0,977	0,480	0,022	0,443	0,465
0,95	1,002	0,480	0,059	0,445	0,493
0,94	1,183	0,480	0,159	0,410	0,580
0,93	1,324	0,440	0,238	0,394	0,649
0,92	1,566	0,360	0,349	0,369	0,712
0,91	1,665	0,360	0,392	0,364	0,749
0,90	2,022	0,400	0,493	0,322	0,811
0,89	2,326	0,360	0,547	0,276	0,834
0,88	2,405	0,400	0,583	0,285	0,875
0,87	2,540	0,400	0,640	0,297	0,915
0,86	2,680	0,360	0,714	0,334	0,998
0,85	2,874	0,320	0,783	0,347	1,020

apresentaram desempenhos melhores exclusivamente nas simulações dos experimentos realizados sob atmosfera estável; e os modelos com derivadas fracionárias menores do que 1 somente

no termo difusivo apresentaram desempenhos melhores apenas nas simulações dos experimentos desenvolvidos sob atmosfera instável. Esse comportamento, aliás, é esperado, uma vez que, nos casos estáveis, o termo advectivo tem uma importância maior do que o termo difusivo, dado que a velocidade do vento é representada por esse termo. Nos casos instáveis, por sua vez, é o termo difusivo que tem maior importância, uma vez que é ele que representa a turbulência convectiva. Dessa forma, tem-se que, em ambas as situações, quando as derivadas fracionárias foram empregadas nos termos de maior relevância para o problema em consideração (nos casos estáveis, o termo advectivo; e nos casos instáveis, o termo difusivo), os desempenhos se mostraram superiores. Na Tab. 5.38 são comparados, entre si e com outros resultados da literatura, os melhores resultados obtidos pelos diferentes modelos empregados neste trabalho.

Tabela 5.38: Comparação entre os melhores resultados de cada modelo.

Experimento	Modelo	NMSE	FA2	FB	CC	FS
—	Valor ótimo	0	1	0	1	0
Copenhagen - 2D	C-AF ($\alpha = 0,999$)	0,040	1,000	-0,004	0,913	0,180
	C-DF ($\alpha = 0,96$)	0,036	1,000	-0,019	0,918	0,113
	C-ADF ($\alpha = 0,99$)	0,037	1,000	-0,001	0,919	0,148
	Wortmann et al. (2005)	0,060	1,000	-0,140	0,920	-0,020
	Kumar; Sharan (2012)	0,050	0,960	-0,040	0,900	0,34
	Moreira; Moret (2018)	0,050	1,000	-0,020	0,900	0,180
Prairie-Grass - 2D (Condições Instáveis)	C-AF ($\alpha = 0,999$)	0,093	0,674	-0,316	0,963	-0,070
	C-DF ($\alpha = 0,94$)	0,058	0,737	-0,221	0,969	0,048
	C-ADF ($\alpha = 0,95$)	0,054	0,789	-0,127	0,958	0,111
	Buske et al. (2006)	0,640	0,680	0,310	0,830	0,460
	Kumar; Sharan (2012)	0,220	0,810	0,130	0,950	0,670
	Moreira et al. (2014)	0,060	0,860	-0,080	0,980	0,010
Prairie-Grass - 2D (Condições Estáveis)	C-AF ($\alpha = 0,96$)	0,221	0,853	0,088	0,829	0,445
	C-DF ($\alpha = 0,999$)	0,656	0,533	0,614	0,842	0,696
	C-ADF ($\alpha = 0,96$)	0,242	0,680	0,127	0,800	0,370
	Carvalho et al. (2007) (Modelo Euleriano)	0,490	0,820	-0,224	0,770	-0,260
	Carvalho et al. (2007) (Modelo Lagrangeano)	0,390	0,950	-0,057	0,810	-0,180
Hanford - 2D	C-AF ($\alpha = 0,90$)	0,172	0,933	0,126	0,907	0,355
	C-DF ($\alpha = 0,999$)	0,775	0,667	0,672	0,917	0,817
	C-ADF ($\alpha = 0,90$)	0,307	0,867	0,295	0,896	0,523
	Sharan; Kumar (2009)	0,220	0,700	-0,207	0,910	0,005
	Moreira et al. (2010)	0,170	0,670	-0,320	0,910	-0,100
Copenhagen - 3D	C-ADF ($\alpha = 0,97$)	0,152	0,870	-0,022	0,778	0,286
	Vilhena et al. (2008)	0,140	0,960	0,070	0,870	-0,003
	Moreira et al. (2019)	0,008	0,960	-0,001	0,940	-0,11
Prairie-Grass - 3D (Condições Instáveis)	C-ADF ($\alpha = 0,90$)	0,128	0,663	-0,087	0,920	-0,101
Prairie-Grass - 3D (Condições Estáveis)	C-ADF ($\alpha = 0,97$)	0,788	0,560	0,265	0,574	0,304

Pode-se observar na Tab. 5.38 que, de modo geral, os modelos empregados neste trabalho, com valores de $0,90 \leq \alpha < 0,999$, apresentaram desempenhos em níveis semelhantes ou, até mesmo, superiores a outros encontrados na literatura. É importante mencionar, porém, que os parâmetros utilizados nos coeficientes de difusão empregados neste trabalho, foram otimizados para modelos com derivadas de ordens inteiras e, diante disso, há a expectativa de que os modelos com derivadas fracionárias possam fornecer resultados ainda melhores, caso se utilizem parâmetros otimizados para esses novos modelos ou, até mesmo, novos coeficientes de difusão. Convém ressaltar também que não foram apresentadas as comparações dos resultados obtidos nas simulações tridimensionais dos experimentos de Prairie-Grass por não terem sido encontrados na literatura outros trabalhos que utilizaram os mesmos dados.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho foram testados modelos matemáticos baseados na equação da advecção-difusão com derivadas de ordens não inteiras na simulação numérica da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária sob diferentes condições de estabilidade. Duas formulações para as derivadas fracionárias foram utilizadas nas simulações: a formulação de Caputo e a de Riemann-Liouville, simulando bidimensionalmente e tridimensionalmente experimentos como os de Copenhagen, de Hanford e de Prairie-Grass, todos consagrados e amplamente utilizados por especialistas da área da dispersão de poluentes na atmosfera na validação de modelos.

Nas simulações bidimensionais, foi possível verificar que os resultados obtidos empregando-se as definições de Caputo e de Riemann-Liouville, independentemente da condição de estabilidade atmosférica, foram muito parecidos, até mesmo com uma leve superioridade dos modelos com derivadas fracionárias de Riemann-Liouville. Ocorre que, conforme já mencionado anteriormente, a derivada de Caputo de uma função constante é nula, algo que não necessariamente ocorre na derivada de Riemann-Liouville. Dessa forma, tem-se que a utilização de derivadas de Caputo permite uma interpretação física mais clara e sólida, especialmente na aplicação das condições de contorno dos problemas. Foi inclusive em razão disso que, no presente trabalho, optou-se por empregar apenas as derivadas de Caputo nas simulações tridimensionais.

Diante do exposto, uma vez que partiu-se da hipótese de que a equação da advecção-difusão, bidimensional ou tridimensional, com derivadas de ordens fracionárias seria capaz de alcançar desempenhos melhores do que a equação clássica (com derivadas de ordens inteiras) na simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, então, diante do que se observou nos resultados, pode-se afirmar que a hipótese realmente se confirmou. Utilizando-se modelos bidimensionais e tridimensionais com derivadas fracionárias em todos os termos, verificou-se que o emprego de ordens de 0,90 a 0,99 levaram a resultados melhores tanto para os experimentos realizados sob condições atmosféricas estáveis quanto para os realizados sob condições instáveis.

Algo que chamou a atenção, porém, foi o fato de que, empregando-se modelos bidimensionais com derivadas fracionárias em apenas um termo, seja no advectivo ou no difusivo, os resultados obtidos apresentaram uma particularidade interessante: os modelos com derivadas fracionárias menores do que 1 somente no termo advectivo apresentaram desempenhos melhores apenas nas simulações dos experimentos realizados sob atmosfera estável enquanto que os modelos com derivadas fracionárias menores do que 1 somente no termo difusivo apresentaram desempenhos melhores apenas nas simulações dos experimentos desenvolvidos sob atmosfera instável.

De fato, observou-se que os modelos com derivadas fracionárias somente no termo advectivo (C-AF e RL-AF) mostraram uma tendência de aumento das concentrações ao longo do domínio à medida em que a ordem da derivada foi sendo diminuída, enquanto que os modelos com derivadas fracionárias apenas no termo difusivo (C-DF e RL-DF) evidenciaram uma tendência de diminuição das concentrações ao longo do domínio à medida em que a ordem da derivada foi sendo diminuída. Esses aspectos, aliados ao fato de que o modelo com derivadas de ordens

próximas a 1 já apresentava as características de subestimar as concentrações nas simulações dos experimentos realizados sob condições atmosféricas estáveis e de superestimar as concentrações nas simulações dos experimentos desenvolvidos sob condições atmosféricas estáveis, levaram, portanto, à melhor representação dos experimentos instáveis pelos modelos C-DF e RL-DF e, dos experimentos estáveis, pelos modelos RL-AF e C-AF.

A superioridade do desempenho, em experimentos estáveis (predominância da fonte de turbulência mecânica devida a velocidade vento), pela equação com derivadas fracionárias no termo advectivo, e a superioridade no desempenho, em experimentos instáveis (predominância da turbulência de origem convectiva), pela equação com derivadas fracionárias no termo difusivo reforçam a ideia de que o emprego de derivadas fracionárias é realmente mais adequado para representar os transportes de contaminantes na Camada Limite Planetária. Nos casos estáveis, o termo advectivo (na direção x) é mais importante do que o termo difusivo (na direção z), pois a velocidade do vento está na direção do eixo x . Nos casos instáveis, o termo de fonte de turbulência convectiva predomina em relação ao termo de fonte de turbulência mecânica de modo que, nesse caso, a difusão ao longo do eixo z é mais importante. Diante disso, tem-se que, em ambas as situações, as derivadas fracionárias estão sendo empregadas nos termos que tem maior relevância para descrever o transporte de contaminantes: nos casos estáveis, o termo advectivo; e nos casos instáveis, o termo difusivo.

Como perspectiva para trabalhos futuros, tem-se a ideia de considerar nos problemas menos hipóteses simplificadoras, acrescentando na equação da advecção-difusão outros termos que até então foram desconsiderados, como os de advecção lateral e de difusão longitudinal que são relevantes para modelar situações de vento fraco, além do termo transiente que é útil para verificar a variação das concentrações ao longo do tempo e a sua evolução para o regime permanente (estacionário).

7 REFERÊNCIAS

- Albani, R.A.S.; Duda, F.P.; Pimentel, L.C.G., *On the modeling of atmospheric pollutant dispersion during a diurnal cycle: A finite element study*. Atmospheric Environment, v. 118: 19–27, 2015.
- Ayer, H.S., *The wind profile at the crest of a large ridge*. Monthly Weather Review, v. 1: 19–23, 1960.
- Barad, N.L., Project Prairie-Grass: A field program in diffusion. Geophysical Research Papers, v. 1: 1–280, 1958a.
- Bojovic, D; Jovanovic, B.S., *Convergence of finite difference method for the parabolic problem with concentrated capacity and variable operator*. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 189: 286–303, 2006.
- Buske, D.; Vilhena, M.T.; Moreira, D.M.; Tirabassi, T., *An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure*. Environ Fluid Mech , v. 7: 43–54, 2006.
- Buske, D.; Vilhena, M.T.; Moreira, D.M.; Tirabassi, T., *Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer*. Atmospheric Environment, v. 41: 5496–5501, 2007.
- Camargo, R.F.; Oliveira, E.C., **Cálculo Fracionário**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2015.
- Carvalho, J.C.; Degrazia, G.; Anfossi, D.; Goulart, A.G.O.; Cuchiara, G.C.; Mortarini, L., *Simulation the characteristic patterns of the dispersion during the sunset PBL*. Atmospheric Research, v. 98: 274–284, 2010.
- Carvalho, J.C.; Moreira, D.M., *Evaluation of two semi-analytical techniques in air quality applications*. Revista Brasileira de Meteorologia, v.22: 10–20, 2007.
- Carvalho, J.C.; Vilhena, M.T.; Thompson, M., **An interactive langevin solution for turbulent dispersion in the atmosphere**. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 206: 534–548, 2007.
- Deardorff, J.W.; Willis, G.E., *Groundlevel concentration fluctuations from a buoyant and a non-buoyant source within a laboratory convectively mixed layer*. Atmospheric Environment, v. 18: 1297–1309, 1984.
- Deardorff, J.W.; Willis, G.E., *Neglect of downstream diffusion - how good an assumption for the daytime mixed layer*. Proc. 3rd Symposium on Atmospheric Turbulence, Diffusion, and Air Quality, Raleigh, North Carolina: 225–258, 1976.

- Degrazia, G.A.; Campos Velho, H.F.; Carvalho, J.C. *Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties*. Contributions to Atmosph. Phys., v. 70: 57–64, 1997.
- Degrazia, G.A.; Vilhena, M.; Moraes, O. *An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion*. Il Nuovo Cimento, v. 19C: 399–403, 1996.
- Demarrais, G.A., *Wind speed profiles at brookhaven national laboratory*. Journal of Meteorology, v. 16: 181–190, 1959.
- Doran, J.C.; Abbey, O.B.; Buck, J.W.; Glover, D.W.; Horst, T.W., *Field Validation of Exposure Assessment Models*. Data Environmental Science Research Laboratory, v. 600: 1–177, 1984.
- Doran, J.C.; Horst, T.W., *An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements*. Atmospheric Environment, v. 19: 939–951, 1985.
- 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, v. 518: 38–49.
- Goulart, A.G.O.; Lazo, M.J.; Suarez, J.M.S., *A deformed derivative model for turbulent diffusion of contaminants in the atmosphere*. Physica A, v. 557: 124847–124858.
- Goulart, A.G.O.; Lazo, M.J.; Suarez, J.M.S.; Moreira, D.M., *Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants*. Physica A, v. 477: 9–19, 2017.
- Goulart, A.G.O.; Vilhena, M.T.; Degrazia, G.; Flores, D.T., *Vertical, lateral and longitudinal eddy diffusivities for a decaying turbulence in the convective boundary layer*. Ecological Modelling, v. 204: 516–522, 2007.
- Guo, B.; Pu, X.; Huang, F., **Fractional Partial Differential Equations and Their Numerical Solutions**. Singapore: World Scientific, 2015.
- Gryning, S.E.; Holstag, A.A.M.; Irwin, J.S.; Silversten, B., *Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters*. Atmospheric Environment, v. 21: 79–89, 1987.
- Gryning, S.E.; Lyck, E., *Atmospheric Dispersion from Elevated Sources in an Urban Area: Comparison between Tracer Experiments and Model Calculations*. Journal of Climate and Applied Meteorology, v. 23: 651–654, 1984.
- Hanna, S.R., *Confidence limits for air quality model evaluations as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods*. Atmospheric Environment, v. 23: 1385–1398, 1989.
- Hilfer, R., **Applications of Fractional Calculus in Physics**. New York: World Scientific Publishing, 2000.

- Jin, B.; Lazarov, R.; Zhou, Z., *Numerical methods for time-fractional evolution equations with nonsmooth data: A concise overview*. Comput. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 346: 332–358, 2019.
- Kilbas, A.A.; Srivastava, M.H.; Trujillo, J.J., **Theory and Application of Fractional Differential Equations**. v. 204, North Holland: Mathematics Studies, 2006.
- Kumar, P.; Sharan, M., **Parameterization of the eddy diffusivity in a dispersion model over homogeneous terrain in the atmospheric boundary layer**. v. 106: 30–43, 2012.
- Lamb, R.G., *A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective boundary layer*. Atmospheric Environment, v. 12: 1297–1304, 1978.
- Lin, Y.; Xu, C., *Finite difference/spectral approximations for the time-fractional diffusion equation*. Journal of Computational Physics, v. 225: 1533–1552, 2007.
- Liu, F.; Zhuang, P.; Anh, V.; Turner, I.; Burrage, K., *Stability and convergence of the difference methods for the space–time fractional advection–diffusion equation*. Applied Mathematics and Computation, v. 191: 12–20, 2007.
- Mandelbrot, B.B., *The fractal geometry of nature*. New York: W.H. Freeman and Company, 1982.
- Mangia, C.; Shipa, I.; Moreira, D.M.; Tirabassi, T.; Degrazia, G.A.; Rizza, U., *A new eddy diffusivity parameterisation for dispersion models: Evaluation in different atmospheric conditions*. Advances in Air Pollution, v. 10: 105–112, 2001.
- Meerschaert, M.M.; Tadjeran, C., *Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations*. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 172: 65–77, 2004.
- Miller, K.S.; Ross, B., **An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations**. New York: John Wiley and sons, 1993.
- Momani, S., *An algorithm for solving the fractional convection–diffusion equation with nonlinear source term*. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, v. 12: 1283–1290.
- Moreira, D.M.; Moret, M., *A New Direction in the Atmospheric Pollutant Dispersion inside the Planetary Boundary Layer*. Journal of applied meteorology and climatology, v. 57: 185–192, 2018.
- Moreira, D.M.; Moraes, A.C.; Goulart, A.G.; Albuquerque, T.T.A., **A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance**. Atmospheric Environment, v. 83: 254–259, 2014.

- Moreira, D.M.; Tirabassi, T.; Carvalho, J.C., *Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers*. Atmospheric Environment, v. 39: 3643–3650, 2005.
- Moreira, D.M.; Tirabassi, T.; Vilhena, M.T.; Goulart, A.G., **A multi-layer model for pollutant dispersion with dry deposition to the ground**. Atmospheric Environment, v. 44: 1859–1865, 2010.
- Moreira, D.M.; Vilhena, M.T.; Buske, D.; Tirabassi, T., *The GILTT solution of the advection–diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL*. Atmospheric Environment, v. 40: 3186–3194, 2006.
- Moreira, D.M.; Vilhena, M.T.; Tirabassi, T.; Buske, D.; Cotta, R., *Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method*. Atmospheric Environment, v. 39: 6289–6294, 2005.
- Moreira, D.M.; Xavier, P.; Palmeira, A.; Nascimento, E., *New approach to solving the atmospheric pollutant dispersion equation using fractional derivatives*. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 144: 118667–118675, 2019.
- Nottrott, A.; Kleissl, J.; Keeling, R., *Modeling passive scalar dispersion in the atmospheric boundary layer with WRF large-eddy simulation*. Atmospheric Environment, v. 82: 172–182, 2013.
- Nunalee, C.G.; Kosović, B.; Bieringer, P.E., *Eulerian dispersion modeling with WRF-LES of plume impingement in neutrally and stably stratified turbulent boundary layers*. Atmospheric Environment, v. 99: 571–581, 2014.
- Ray, S.S., *Analytical solution for the space fractional diffusion equation by two-step Adomian Decomposition Method*. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, v. 14: 1295–1306.
- Reis, J.K.; Carvalho, J.C.; Buske, D.; Quadros, R.S., *Pollutant dispersion simulation during sunset transition time using an analytical eulerian model*. Journal of Environmental Engineering, v. 6(4A):40–45, 2016.
- Richardson, L.F., *Atmospheric Diffusion Shown on a Distance-Neighbour Graph*. Proceedings of the Royal Society of London, v. 110(756): 709–737, 1926.
- Podlubny, I., **Fractional Differential Equations**. San Diego: Academic Press, 1999.
- Sabatier, J.; Agrawal, O.P.; Tenreiro Machado, J.A., **Advances in Fractional Calculus: Theoretical Developments and Applications in Physics and Engineering**. Dordrecht: Springer, 2007.

- Samko, S.G.; Kilbas, A.A.; Marichev, O.I., **Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications**. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishers, 1993.
- Seinfeld, J.H.; Pandis, S.N., **Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution and Climate Change**. New Jersey: John Wiley & Sons, 2006.
- Sharan, M.; Kumar, P., **An analytical model for crosswind integrated concentrations released from a continuous source in a finite atmospheric boundary layer**. *Atmospheric Environment*, v. 43: 2268–2277, 2009.
- Stefanello, M.B.; Degrazia, G.A.; Mortarini, L.; Buligon, L.; Maldaner, S.; Carvalho, J.C.; Acevedo, O.C.; Martins, L.G.N.; Anfossi, D.; Buriol, C.; Roberti, D., *Development of an analytical Lagrangian model for passive scalar dispersion in low-wind speed meandering conditions*. *Physica A*, v. 492: 1007–1015, 2017.
- Stull, R.B., **An introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht: Academic Publishers, 1988.
- Tayebi, A.; Shekari, Y.; Heydari, M.H., *A meshless method for solving two-dimensional variable-order time fractional advection–diffusion equation*. *Journal of Computational Physics*, v. 340: 655–669, 2017.
- Taylor, A.C.; Beare, R.J.; Thomson, D.J. *Simulating Dispersion in the Evening-Transition Boundary Layer*. *Boundary-Layer Meteorology*, v. 153: 389–407, 2014.
- Turner, B., **Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates**. USA: U.S. Environmental Protection Agency, 1970.
- Versteeg, H.K.; Malalasekera, W., *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Essex: Pearson, 2007.
- Vilhena, M.T.; Costa, C.P.; Moreira, D.M.; Tirabassi, T., **A semi-analytical solution for the three-dimensional advection–diffusion equation considering non-local turbulence closure**. *Atmospheric Research*, v. 90: 63–69, 2008.
- West, B.J., *Colloquium: Fractional calculus view of complexity: A tutorial*. *Reviews of Modern Physics*, v. 86: 1169–1184, 2014.
- Wortmann, S.; Vilhena, M.T.; Moreira, D.M.; Buske, D., *A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL*. *Atmospheric Environment*, v. 39: 2171–2178, 2005.
- Yang, Q.; Liu, F.; Turner, I., *Numerical methods for fractional partial differential equations with Riesz space fractional derivatives*. *Applied Mathematical Modelling*, v. 34: 200–218, 2010.
- Zhou, Y., **Basic theory of fractional differential equations**. Singapore: World Scientific, 2014.

8 ANEXOS

Tabela 8.1: Concentrações integradas lateralmente (C^y/Q) e concentrações máximas (C_{max}/Q) observadas no experimento de Copenhagen.

Exp.	$x(m)$	$C^y/Q(10^{-4}sm^{-2})$	$C_{max}/Q(10^{-7}sm^{-3})$
1	1900	6,48	10,50
	3700	2,31	2,14
2	2100	5,38	9,85
	4200	2,95	2,83
3	1900	8,20	16,33
	3700	6,22	7,95
	5400	4,30	3,76
4	4000	11,66	15,71
5	2100	6,71	12,11
	4200	5,84	7,24
	6100	4,97	4,75
6	2000	3,96	7,44
	4200	2,22	3,37
	5900	1,83	1,74
7	2000	6,70	9,48
	4100	3,25	2,62
	5300	2,23	1,15
8	1900	4,16	9,76
	3600	2,02	2,64
	5300	1,52	0,98
9	2100	4,58	8,52
	4200	3,11	2,66
	6000	2,59	1,98

Tabela 8.2: Concentrações integradas lateralmente, C^y (g/m²), observadas nos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis.

Exp.	C^y (g/m ²)				
	($x=50\text{m}$)	($x=100\text{m}$)	($x=200\text{m}$)	($x=400\text{m}$)	($x=800\text{m}$)
1	7,00	2,30	0,51	0,16	0,06
5	3,30	1,80	0,81	0,29	0,09
7	4,00	2,20	1,00	0,40	0,18
8	5,10	2,60	1,10	0,39	0,14
9	3,70	2,20	1,00	0,41	0,13
10	4,50	1,80	0,71	0,20	0,03
16	5,00	1,80	0,48	0,10	0,02
19	4,50	2,20	0,86	0,27	0,06
20	3,40	1,80	0,85	0,34	0,13
25	7,90	2,70	0,75	0,30	0,06
26	3,90	2,20	1,04	0,39	0,13
27	4,30	2,30	1,16	0,46	0,18
30	4,20	2,30	1,11	0,40	0,10
43	5,00	2,40	1,09	0,37	0,12
44	4,50	2,30	1,09	0,43	0,14
49	4,30	2,40	1,16	0,45	0,15
50	4,20	2,30	0,91	0,39	0,11
51	4,70	2,40	1,00	0,38	0,08
61	3,50	0,21	1,14	0,53	0,20

Tabela 8.3: Concentrações máximas, $C_{max}(10^{-3} \text{ g/m}^3)$, observadas nos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas instáveis.

Exp.	$C_{max}(10^{-3} \text{ g/m}^3)$				
	($x=50\text{m}$)	($x=100\text{m}$)	($x=200\text{m}$)	($x=400\text{m}$)	($x=800\text{m}$)
1	139,00	25,60	4,38	1,12	0,26
5	203,00	55,70	14,80	2,82	0,48
7	97,80	23,30	4,64	0,76	0,07
8	422,00	115,00	26,40	4,25	0,73
9	200,00	56,10	14,20	2,90	0,52
10	179,00	43,10	11,40	2,70	1,22
16	182,00	34,40	6,39	0,96	0,08
19	218,00	54,80	13,40	2,30	0,37
20	171,00	52,20	15,90	3,42	0,80
25	305,00	41,00	8,14	1,46	0,24
26	158,00	48,50	12,90	2,75	0,54
27	221,00	73,10	19,70	4,73	0,98
30	221,00	67,80	17,50	3,02	0,69
43	249,00	58,20	16,90	2,63	0,54
44	168,00	53,90	15,10	3,12	0,61
49	209,00	66,80	18,70	3,32	0,63
50	243,00	77,00	18,30	3,83	0,60
51	267,00	71,00	18,60	3,12	0,45
61	201,00	55,70	17,30	4,33	0,96

Tabela 8.4: Concentrações integradas lateralmente, C^y (g/m²), e Concentrações máximas, C_{max} (10⁻³ g/m³), observadas nos experimentos de Prairie-Grass realizados sob condições atmosféricas estáveis.

Exp.	C^y (g/m ²)			C_{max} (10 ⁻³ g/m ³)		
	($x=50m$)	($x=200m$)	($x=800m$)	($x=50m$)	($x=200m$)	($x=800m$)
13	38	223	133	174	490	104
14	153	153	31	702	402	21,6
17	105	34	11	645	88,2	9,74
18	108	46	20	620	95	14
21	58	18	6	275	29,6	3,26
22	47	14	4	224	27,7	2,51
23	47	17	4	176	19,5	2,09
24	47	15	4	158	17	1,92
28	136	51	15	488	59,5	10,1
29	99	38	12	248	27,6	2,6
32	159	115	56	729	285	58,6
35	88	32	10	680	253	13,8
36	193	100	41	830	203	38,8
37	61	21	7	224	22,9	2,08
38	78	26	8	360	51,4	6,44
41	79	32	12	450	67,8	9,92
42	52	17	5	276	31,5	3,13
46	63	23	7	564	60,8	6,33
53	154	83	32	923	233	34,2
54	81	30	11	422	62	9,51
55	53	18	5	219	27,2	2,83
56	71	24	7	308	36,3	4,74
58	161	105	51	1000	311	59,4
59	140	81	31	723	239	39,4
60	62	23	8	302	43,6	6,07

Tabela 8.5: Concentrações de SF_6 integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão, C^y/Q (s/m²), registradas no experimento de Hanford.

Exp.	C^y/Q (s/m ²)				
	($x=100m$)	($x=200m$)	($x=800m$)	($x=1600m$)	($x=3200m$)
1	0,0195	0,0117	0,00373	0,00214	0,00130
2	0,0519	0,0367	0,0129	0,00908	0,00722
3	0,0271	0,0181	0,00591	0,00331	0,00179
4	0,0918	0,0486	0,0201	0,0131	0,00915
5	0,0839	0,0424	0,0105	0,00861	0,00664
6	0,0884	0,0611	0,0134	0,00615	0,00311