



## UMA ABORDAGEM COM CÁLCULO FRACIONÁRIO AO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM SOLOS TROPICAIS LATERÍTICOS

R.M. de Moraes<sup>1</sup>, S. Crestana<sup>2</sup>, A.L.B. Cavalcante<sup>1</sup>

(1) Universidade de Brasília, Campus Universitário Darcy Ribeiro, 70910-900, Brasília, DF  
ricardo\_m\_moraes@hotmail.com, abrasil@unb.br

(2) Embrapa Instrumentação, Rua XV de Novembro, 1452, 13560-970, São Carlos, SP,  
silvio.crestana@embrapa.br

**Resumo:** Curvas de eluição (BTCs) obtidas a partir de ensaios em coluna com solos heterogêneos, não são satisfatoriamente simuladas com a equação advectiva-dispersiva (ADE) clássica para alguns casos com cauda acentuada. Além disso, o coeficiente de dispersão calculado com a ADE é dependente da escala. Neste trabalho, comparamos o uso de uma ADE fracionária (FADE) e a ADE clássica para ajustar ensaios em coluna feitos com solos lateríticos brasileiros, discutindo ambas as teorias de transporte de contaminantes. A FADE pode simular com mais precisão BTCs com cauda acentuada e ao simular uma dispersão mais “rápida”, diminui a dependência da escala.

**Palavras-chave:** cálculo fracionário, transporte de contaminantes, solos tropicais lateríticos.

### *A FRACTIONAL CALCULUS APPROACH TO CONTAMINANT TRANSPORT IN TROPICAL LATERITIC SOILS*

**Abstract:** Breakthrough curves (BTCs) obtained from column tests in heterogeneous soils are not satisfactorily simulated with the advection-dispersion equation (ADE) for some heavy tailed cases. Furthermore, the dispersion coefficient calculated with the ADE is scale dependent. In this text we compare the usage of a fractional ADE (FADE) and the classical ADE to fit column tests BTCs made with Brazilian lateritic soils, discussing both contaminant transport theories. The FADE more accurately simulates heavy tailed BTCs, and by simulating a faster dispersion rate, reduces scale dependency.

**Keywords:** fractional calculus, contaminant transport, tropical lateritic soils.

## 1. Introdução

O difundido uso do modelo clássico de transporte de contaminante trouxe observações indesejáveis ao uso do mesmo. Pachepsky et al. (2000) listam publicações onde é observada a dependência do coeficiente de dispersão à escala do problema, e o desvio do formato de sigmoide ideal, simulado pelo modelo, em curvas de eluição experimentais, principalmente a porção inicial e final das curvas, ou a “cauda”.

Neste trabalho estudou-se uma abordagem fracionária ao transporte de contaminantes, na linha de Tarasov (2005) que escreve que o uso de integrações e derivações fracionárias se dá na generalização de equações que descrevem meios mais complexos, com o objetivo de descrever os processos dinâmicos que ocorrem nos mesmos.

## 2. Materiais e Métodos

### 2.1. O Modelo Clássico

O modelo amplamente utilizado para simular o transporte de contaminantes em meio poroso, aqui denominado de modelo clássico, é fundamentado na ADE (advection dispersion equation), dada em uma dimensão por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial x} + D_H \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (1)$$

onde,  $c$  é a concentração de soluto [ $M/L^3$ ],  $v$  é a velocidade linear média [ $L/T$ ],  $x$  é o domínio espacial [ $L$ ],  $t$  é o tempo [ $T$ ] e  $D_H$  é o coeficiente de Dispersão hidrodinâmico [ $L^2/T$ ]. A ADE tem solução para

condição inicial e de contorno do tipo fonte pontual,  $c(x,0)=1$  e  $\partial c(\pm\infty,t)/\partial x =0$ , obtida através de transformada de Fourier:

$$\hat{c} = \exp[-v(ik)t + D(ik)^2 t] \tag{2}$$

cuja transformada inversa é a função de densidade probabilística de uma distribuição normal, ou gaussiana, com média  $vt$  e desvio padrão  $\sqrt{2D_H t}$ .

Assim, a ADE simula a dispersão de partículas de contaminantes proporcionalmente a  $t^{1/2}$ , chamada então de “normal” ou Fickiana. Schumer et al. (2009) mostra, através de um modelo de *random walk*, que a solução da ADE dada acima simula a movimentação de partículas de acordo com o movimento Browniano (Figura 1).

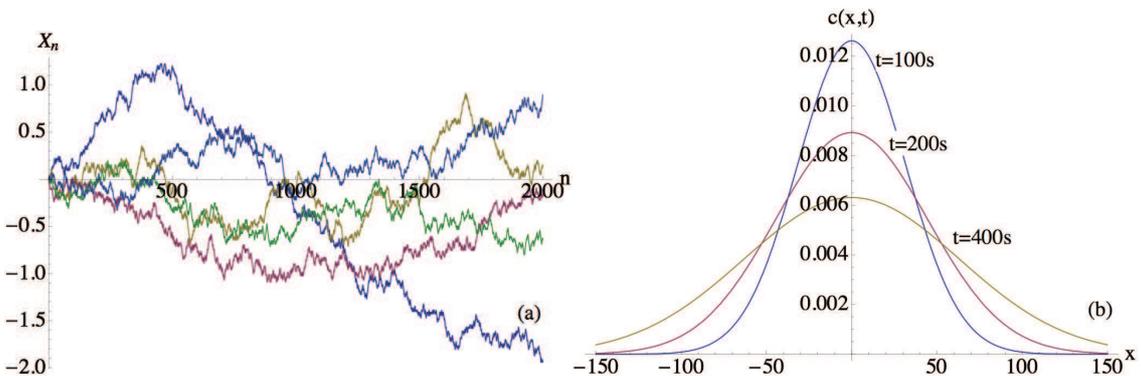


Figura 1. (a) Movimento Browniano como o limite de escala de um *random walk* simétrico para 2000 passos, e (b) a correspondente concentração de partículas no tempo 100s, 200s e 400s.

### 2.2. O Modelo Fracionário

A inclusão do cálculo fracionário no modelo de transporte parte pela adoção da Lei de Fick fracionária (Paradisi et al., 2001; Schumer et al., 2001):

$$F = -\frac{1}{2} D_f D^\alpha c(x,t) \tag{3}$$

onde,  $D^\alpha$  é a derivada fracionária de ordem  $\alpha$  e  $D_f$  o coeficiente de dispersão hidrodinâmica fracionário de unidade  $[L^\alpha/T]$ . Substituindo a Eq. (4) na mesma equação de continuidade ( $-\partial c/\partial t = \text{div}F$ ) que dá origem a ADE, tem-se (Schumer et al., 2001):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial x} + D_f D^\alpha c \tag{4}$$

A FADE (fractional advection dispersion equation) em uma dimensão, contendo termo dispersivo com derivada espacial fracionária de ordem  $1 < \alpha \leq 2$ . Benson (1998) reescreve a FADE da seguinte forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{1}{2} (1 + \beta) D_f D_+^\alpha c + \frac{1}{2} (1 - \beta) D_f D_-^\alpha c \tag{5}$$

incluindo o parâmetro de assimetria  $-1 < \beta < 1$ . Nota-se que se  $\beta=0$  a Eq. (6) retorna a Eq. (5), e se  $\alpha=2$  a FADE (Eq. 6) retorna a ADE (Eq. 1).

A Solução da FADE para condição inicial e de contorno do tipo fonte pontual  $c(x,0)=1$  e  $\partial c(\pm\infty,t)/\partial x=0$  também é obtida por transformada de Fourier (Benson, 1998):

$$\hat{c} = \exp\{-D_f |\cos(\pi\alpha/2)| t |k|^\alpha [1 + i\beta \tan(\frac{\pi\alpha}{2}) \text{sgn}(k)] - ivtk\} \tag{6}$$

Esta solução não possui transformada inversa que possa ser expressa analiticamente, porém rescrevendo em forma de função característica  $F[f(-k)]=\phi(k)$ , i.e., substituindo  $k$  por  $-k$ , chega-se na função característica de

uma distribuição *stable* (Nolan, 2003), ou  $\alpha$ -stable, com parâmetro de localização  $\delta=vt$  e parâmetro de escala  $\gamma = \sqrt[\alpha]{D_f |\cos(\pi\alpha/2)|}t$ . Para  $\alpha=2$  recupera-se a Eq. 2.

A dispersão de partículas simulada pela FADE é chamada de não-Fickiana ou “super-dispersão”, pois o espalhamento de partículas é dado mais aceleradamente e proporcional a  $t^{1/\alpha}$ . Da mesma forma que para a ADE, Schumer et al. (2009) mostra, através de um modelo de *random walk*, que a solução da FADE dada acima simula a movimentação de partículas de acordo com o modelo anômalo do Lévy Flight (Figura 2).

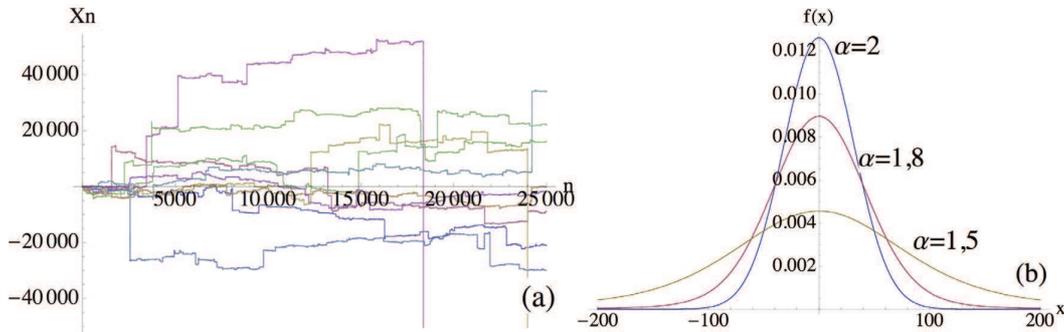


Figura 2. (a) Lévy flight como o limite de escala de um *random walk* com probabilidade seguindo uma distribuição de Cauchy para 2500 passos. (b) A concentração de partículas do Lévy flight para  $\alpha=2$  (Distribuição normal ou ADE),  $\alpha=1,8$  e  $\alpha=1,5$ .

### 2.3. Metodologia

A fim de comparar o uso da FADE e ADE para simular curvas de eluição reais, os ensaios em coluna com solos lateríticos feitos por Carvalho (2001) foram selecionados pela sua fiabilidade e relevância geográfica. Nestes estudos, um solo tropical laterítico foi obtido a partir de um aterro sanitário localizado em Minas Gerais, Brasil. Utilizou-se duas amostras indeformadas de solo *in situ*, uma extraída a 3,0 m de profundidade e outra a 7,0 m.

O método dos mínimos quadrados (MMQ) foi usado para ajustar as curvas de eluição experimentais resultantes. Para uma velocidade de fluxo  $v$  fixa, determinada pelos ensaios, foi criado um algoritmo no software Wolfram Mathematica® para minimizar o erro da soma do quadrado das diferenças entre os dados experimentais e as curvas calculadas teoricamente por cada modelo matemático, obtendo-se assim os parâmetros ajustados  $D_H$  para o modelo clássico, e  $D_f$  e  $\alpha$  para o modelo fracionário (Morales e Cavalcante, 2014).

### 3. Resultados e Discussão

A Figura 3 mostra os resultados do ajuste das curvas de eluição experimentais utilizando o modelo clássico e fracionário por meio do método MMQ, como descrito acima. A Tabela 1 compara os parâmetros ajustados das curvas mostradas na Figura 3.

A eficiência da FADE em simular os resultados dos ensaios em coluna é maior do que a da ADE quando os valores calculados de  $\alpha$  se aproximam do limite inferior  $1 < \alpha$ . Para valores próximos do limite superior  $\alpha=2$ , onde os modelos coincidem, a FADE mostra menor melhoria, correspondente ao coeficiente de determinação de cada modelo (Tabela 1).

Os resultados do ajuste acima indicam que as amostras *in situ*, estando em estado natural e indeformado, representam um material mais complexo e heterogêneo, resultando em um campo de velocidade de fluxo com elevada variância e gerando uma maior dispersão de partículas de contaminantes ou uma super-dispersão, logo o baixo índice de derivação  $\alpha$  e grande aumento no coeficiente de dispersão. A amostra *in situ* mais profunda apresentou uma ordem de derivação um pouco mais conservadora em relação à de 3,0 m de profundidade, devido ao material com vazios naturalmente mais organizados em profundidades maiores.

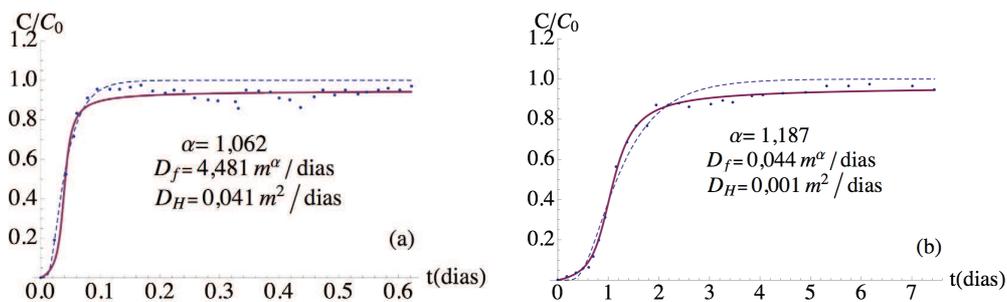


Figura 3. (a) Ajuste do ensaio em coluna com solo *in situ* (3m) e cádmio. (b) Ajuste do ensaio em coluna com solo *in situ* (7m) e chumbo. (c) Ajuste do ensaio em coluna com solo compactado (cádmio). (FADE) Linhas contínuas; (ADE) linhas tracejadas.

Tabela 1. Comparação do ajuste dos pontos experimentais pela ADE e FADE.

	Amostra	$\alpha$	$D_f / D_H$	ADE R <sup>2</sup>	FADE R <sup>2</sup>
Figura 3a	3,0m <i>in situ</i> (Cd+2)	1,062	108,29	0,970	0,962
Figura 3b	7,0m <i>in situ</i> (Pb+2)	1,187	43	0,992	0,986

#### 4. Conclusões

O modelo matemático fracionário de transporte de contaminantes, fundamentado na FADE, que tem como solução a densidade de uma distribuição *stable* (estável), da qual a distribuição gaussiana resultante da ADE é um caso específico, apresentou um ajuste mais preciso em relação a ensaios em coluna feitos com solos tropicais lateríticos brasileiros, exceto quando o índice de derivação  $\alpha$  se aproximou de 2 (ponto onde os modelos clássico e fracionário se igualam).

Assim, o trabalho aqui apresentado contribui para a ratificação da eficiência do modelo fracionário, ou da FADE, em melhor simular o transporte de solutos em meios heterogêneos, incluindo solos tropicais brasileiros, onde a dispersão de partículas pelo mesmo é mais fielmente representada pelo movimento aleatório descrito no *Levy Flight* em comparação com o movimento *Browniano* descrito pela ADE e consequentemente o modelo clássico.

#### Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e a Universidade de Brasília (UnB) pelo apoio financeiro e acadêmico.

#### Referências

- BENSON, D. A., The fractional advection-dispersion equation: Development and application, Ph.D. thesis, Univ. of Nev., Reno, 1998.
- CARVALHO, A. L., Contaminação de Águas Subsuperficiais em Área de Disposição de Resíduos Sólidos Urbanos: O Caso do Antigo Lixão de Viçosa (MG). Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa, M.G., 2001, 148 p.
- MORAES, R. M. de, A. L. B. CAVALCANTE, Simulating Lateritic Soil Column Tests With The Space Fractional Advection- Dispersion Equation, EJGE, Vol.19/Q, 2014.
- NOLAN, J. (2003). Stable distributions: models for heavy-tailed data. Birkhauser. 2003
- PACHEPSKY, Y., DAVID, B., WALTER, R, Simulating Scale-De- pendent Contaminant Transport in Soils with the Fractional Advective-Dispersive Equation, Soil Sci. Soc. Am. J., 64: 1234-1243, 2000.
- PARADISI, P., CESARI, R., MAINARDI, F., AND TAMPIERI, F., The fractional Fick's law for non-local transport processes, Physica A, 293, 130-142, 2001.
- SCHUMER R., BENSON, D.A., MEERSCHAERT, M.M., WHEATCRAFT, S.W., Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation, J.Contaminant Hydrol.48 69-88, 2001.
- SCHUMER, R., MEERSCHAERT, M. M., AND BAEUMER, B., Fractional advection-dispersion equations for modeling transport at the Earth surface, J. Geophys. Res., 114, F00A07, doi:10.1029/2008JF001246, 2009.
- TARASOV, V. E. Fractional Fokker-Planck equation for fractal media. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 15(2), 023102, 2005.