

MODELAGEM DO FENÔMENO DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA DE ÍONS INORGÂNICOS DO CHORUME NO SOLO

Adriana de Souza Forster Araújo

Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ

adriana@metal.eeimvr.uff.br

José Adilson de Castro

Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ

adilson@metal.eeimvr.uff.br

Alexandre José da Silva

Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ

ajs@metal.eeimvr.uff.br

Elizabeth Ritter

Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Departamento de Engenharia Sanitária e do Meio Ambiente, UERJ, Rua São Francisco Xavier, 524/5029-F Maracanã - 20550-900 - Rio de Janeiro - RJ

ritter@uerj.br

Resumo: O presente trabalho consiste no desenvolvimento e validação de um modelo de previsão da dinâmica dos íons inorgânicos, amônio e potássio, nos solos de aterros. O modelo baseia-se na solução simultânea das equações de movimento do líquido contaminante (chorume) no meio poroso (solo), com as respectivas equações de transporte do mesmo. O fenômeno de sorção é modelado através da determinação das taxas de transferência de massa acopladas às equações de transporte dos contaminantes. As equações resultantes da modelagem são resolvidas numericamente através da técnica de volumes finitos. O modelo é validado através dos resultados de ensaios de difusão, disponíveis na literatura. A modelagem proposta neste trabalho baseia-se em um mecanismo de resistência ao transporte devido a três processos distintos: 1) transporte do contaminante da fase líquida até a superfície da partícula; 2) sorção/desorção do contaminante na superfície da partícula e 3) difusão do contaminante no interior do líquido que penetra na partícula de solo. A formulação da taxa total de transferência de massa pode ser estabelecida através de uma equação que represente o transporte na camada limite hidrodinâmica, sorção na interface e difusão na camada limite de concentração na superfície da partícula. Os resultados obtidos para as condições de laboratório foram utilizados em simulações computacionais visando demonstrar a capacidade de previsão do modelo e ajustes dos parâmetros visando a determinação e aferição de modelos para aplicações em monitoramento do solo. Os resultados obtidos foram comparados com resultados simulados utilizando-se como condição de contorno apenas o fenômeno da sorção modelados a partir das isotermas de sorção.

Palavras-Chave: Modelagem computacional, Cinética de sorção, chorume.

1. Introdução

A deposição final e o transporte de poluentes inorgânicos que atingem o solo e subsolos podem estar diretamente relacionados com os fenômenos da sorção/desorção, difusão e convecção. Estes processos ocorrem devido à interação entre as fases líquidas e sólidas do solo. No modelamento de sistemas envolvendo fases líquidas e sólidas, contaminantes / solo, é necessário que os fenômenos de transferência de massa sejam quantificados (Perry et al, 1995). Sendo possível assim, uma avaliação do risco ou da definição de alternativas de descontaminação.

A sorção pode ser considerada um termo genérico, utilizado para indicar os processos pelos quais os solutos (íons, moléculas e compostos) são repartidos entre a fase líquida / gasosa e a superfície das partículas sólidas do solo. Frequentemente, o termo sorção é considerado sinônimo do termo adsorção que se refere à adesão de íons ou moléculas do fluido na superfície das partículas do solo. A desorção refere-se ao processo contrário à sorção, isto é, a transferência de matéria (íons, moléculas, compostos) da fase sólida para a fase líquida do solo.

A difusão molecular dos solutos ocorre em função do gradiente de concentração das espécies químicas, gradiente este que será a sua força motriz, independentemente da existência ou não de um movimento do fluxo.

A identificação das leis que regem os mecanismos de transporte, seleção de um modelo teórico, determinação de parâmetros específicos para cada caso e resolução das equações que regem o problema, é de fundamental importância para um adequado modelamento do processo de transporte de contaminantes. As análises de campo não devem ser desprezadas, para a valiação do modelo e realização de previsões mais eficientes.

É comum que se considere que este fenômeno seja linear e não dependa da saturação da água no solo, Perry et al (1985). Porém, em muitos casos, esta consideração resulta em discrepâncias entre os modelos e resultados experimentais obtidos em campo e laboratório, Leite et al (2001).

A avaliação do fenômeno sorcivo em um aquífero, é em geral, realizada através das isotermas de sorção. Estas correspondem às funções que correlacionam valores de concentração no meio poroso com valores de concentração na solução que faz parte do transporte de contaminantes. Para o caso de baixas concentrações, o processo de adsorção pode ser modelado como sendo linear e reversível. Porém, para altas concentrações, a adsorção é não-linear e relações mais complexas entre as concentrações na fase sólida e no soluto têm sido idealizadas. Os modelos mais utilizados para descrever o comportamento de adsorção do solo são os de Freundlich e Langmuir, Leite (2001).

Através da simulação computacional a previsão do transporte dos contaminantes foi determinada para as condições de saturação do ensaio de difusão. Os resultados de concentração dos contaminantes ao longo do tempo utilizando-se de equações de taxas de transferência de massa foram comparados com resultados experimentais apresentados na literatura. As previsões do modelo mostraram-se em melhor concordância com os resultados experimentais quando comparados com modelos teóricos baseados em isotermas de sorção.

Os parâmetros experimentais utilizados neste trabalho foram baseados nos resultados obtidos experimentalmente por Ritter & Gatto (2003). Foram realizados ensaios de difusão molecular com o solo e o choro de Aterro Metropolitano de Gramacho, localizado no cidade de Duque de Caxias – RJ.

2. Modelagem

2.1. Transporte de *Momentum*

O movimento do líquido no interior do recipiente utilizado no ensaio de difusão, pode ser modelado segundo as equações de transporte de momentum em um leito poroso (Poirier et al, 1994) conforme mostrado na Eq. (1).

$$\frac{\partial(\rho_1 \varepsilon_1 u_k)}{\partial t} + \text{div}(\rho_1 \varepsilon_1 \bar{U}_1 u_k) = \text{div}(\mu_1 \text{grad } u_k) + \rho_1 \varepsilon_1 \bar{g} + F_s^1 \quad (1)$$

Simultaneamente, visando determinar a fração volumétrica de líquido, ε_1 , a equação da continuidade é resolvida (Bird et al, 2002; Sillatery, 1999).

$$\frac{\partial(\rho_1 \varepsilon_1)}{\partial t} + \text{div}(\rho_1 \varepsilon_1 \bar{U}_1) = 0 \quad (2)$$

A interação solo- líquido é modelada pela equação de Kozeny-Karmam modificada que representa de forma satisfatória a condição de escoamento em leito poroso não saturado, Castro(2000), Gaskel (1992) e Poirier et al (1994).

$$\bar{F}_s^1 = \frac{\rho_1}{r_h} |\bar{U}_1 - \bar{U}_s| \left(5\beta + 0.4\beta^{0.1} \right) (\bar{U}_1 - \bar{U}_s) \quad (3)$$

Onde ρ_1 representa a densidade da fase líquida, \bar{U}_1 a velocidade da fase líquida, \bar{U}_s a velocidade da fase sólida, r_h o raio hidráulico, β o coeficiente de arraste, ambos definidos a seguir:

$$\beta = \frac{\mu_L}{\rho_L |\bar{U}_L - \bar{U}_S| r_h} \quad (4)$$

$$r_h = \frac{\phi_L \phi_S d_S}{6 \varepsilon_S} \quad (5)$$

2.2. Equações de transporte de contaminantes

O transporte dos contaminantes amônio e potássio, que são compostos contidos no chorume de aterros pode ser transportado por sorção, advecção e difusão no interior dos solos. A eq. 6 representa o transporte do contaminante no líquido e sua absorção pelo solo. Na Eq. 6, o índice i representa o solo ou o líquido do chorume. As variáveis ϕ_k representam os contaminantes nas fases sólida e líquida, respectivamente. Para o caso dos contaminantes é necessário a solução simultânea das espécies químicas tanto na fase sólida quanto na fase líquida, Bird et al (2002) e Castro (2000).

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi_k)}{\partial t} + \text{div}(\rho_i \varepsilon_i \bar{U}_i \phi_k) = \text{div}(\Gamma_\phi \text{grad} \phi_k) + S_\phi \quad (6)$$

Os chamados termos fontes da eq. 6 englobam a transferência de massa da fase sólida para a fase líquida e vice-versa. A modelagem dos termos fontes para este trabalho foram modelados segundo um mecanismo de resistência ao transporte devido a 3 processos distintos: 1) transporte do contaminante da fase líquida até a superfície da partícula; 2) sorção/desorção do contaminante na superfície da partícula e 3) difusão do contaminante no interior do líquido que penetra no interior da partícula de solo. Estes 3 processos são esquematicamente visualizados na figura 1.

A Figura 1 representa os fenômenos que ocorrem dentro e fora da partícula sólida. No interior da partícula acontece o fenômeno difusivo estacionário, ou seja, a difusão ocorre devido ao gradiente de concentração existente no líquido intersticial.

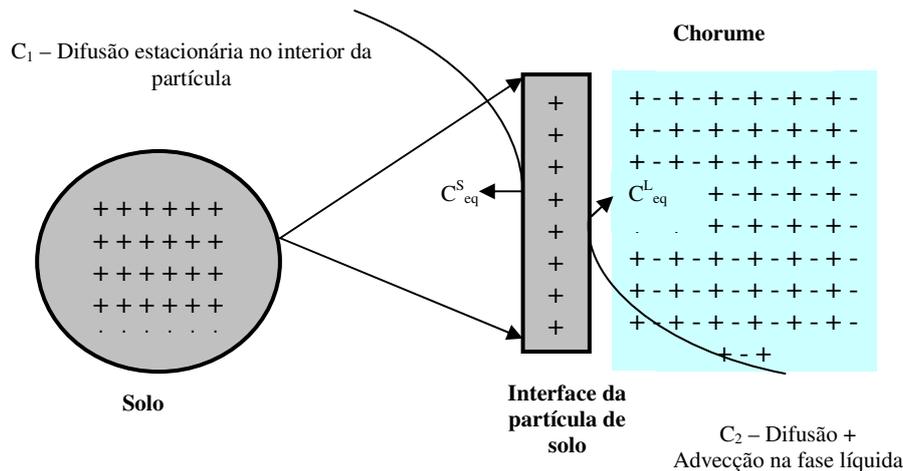


Figura 1: Mecanismo para a formulação da cinética de sorção de contaminantes inorgânicos.

Na parte externa, que está em contato com o contaminante, a difusão e a convecção ocorrem simultaneamente, formando uma camada limite hidrodinâmica e de concentração. Na interface ocorre fenômenos de sorção nos sítios ativos. A concentração de equilíbrio no líquido intersticial da partícula é diferente da concentração de equilíbrio na fase líquida do contaminante. Isto se deve à ação física e química da fina parede da partícula, que permite a ocorrência de um equilíbrio químico no líquido intersticial e um equilíbrio diferente no contaminante. A geometria da partícula sólida naturalmente influencia os valores da concentração de equilíbrio dentro e fora da mesma, balanceando as forças para permitir que o equilíbrio ocorra mesmo havendo gradiente de concentração da fase líquida no interior da partícula e a fase líquida no líquido contaminante.

A taxa de transferência de massa no sistema dependerá dos mecanismos de renovação do contaminante na camada limite, a sorção propriamente dita na superfície e posterior difusão para o interior da partícula. A formulação da taxa total de transferência de massa poderá ser estabelecida através de uma analogia de circuitos elétricos com uma resistência em série do transporte na camada limite hidrodinâmica, sorção na interface e difusão na camada limite de concentração no exterior da partícula.

A taxa de transferência de massa foi então formulada como segue:

$$\frac{dC}{dt} = k A_{1-s} \beta_e [\rho_{\text{líquido}} \epsilon_{\text{líquido}}] [C_i^{L,S} - C_{eq_i}^{L,S}]^n \quad (7)$$

Onde:

k = constante cinética;

$C_i^{L,S}$ = concentração da espécie química na fase líquida (chorume) em função do tempo;

$C_{eq_i}^{L,S}$ = concentração de equilíbrio da espécie química na fase líquida contida nos interstícios do solo;

n = expoente que indica a ordem da equação.

O termo A_{1-s} representa a área de contato entre as fases sólida e líquida é calculada a partir da equação 8 (Yagi, 1993).

$$A_{1-s} = \frac{6 \epsilon_s}{\phi_s d_s} \quad (8)$$

Onde:

ϵ_s = fração volumétrica da fase sólida;

d_s = diâmetro médio das partículas de solo (μm);

ϕ_s = fator de forma da partícula de solo.

O coeficiente de transferência de massa β_e (m/s) no interior do fluido contaminante pode ser modelado como segue, segundo Oeters et al (1994);

$$\beta_e = \frac{Sh D_i^l}{\phi_s d_s} \quad (9)$$

D_i^l = coeficiente de difusão da espécie química i , na fase líquida (m^2/ano);

Sh = número de Sherwood.

$$Sh = 1,17(\text{Re}_{1-s})^{0,585} (\text{Sc}_i)^{1/3} \quad (10)$$

Re = número de Reynolds modificado entre as fases líquidas e sólidas definido na equação 11;

Sc_i = número de Schmidt.

$$\text{Re}_{1-s} = \frac{\rho_l \epsilon_l |U_l - U_s|}{\mu_l} \phi_s d_s \quad (11)$$

$$\text{Sc}_i = \frac{\mu_l}{\rho_l D_i^l} \quad (12)$$

O termo μ_l representa a viscosidade da fase líquida, ρ_l a densidade da fase líquida e D_i^l coeficiente de difusão da espécie química (íon), na fase líquida.

As equações que representam a taxa de transferência de massa para os íons envolvidos neste estudo, foram formuladas, para fins da simulação, da seguinte forma:

$$\frac{dc}{dt} = - k \beta_e A_{s-1} [\rho_{\text{líquido}} \epsilon_{\text{líquido}}] [C_i^l - C_{eq_i}^l]^n * C_i^l \quad (13)$$

O sinal negativo indica o sentido da transferência de massa, que neste caso é do líquido para o sólido (do chorume para o solo).

O termo i representa os íons (K^+ e NH_4^+) que são sorvidos pelo solo.

2.3. Simulação numérica

A solução das equações de momentum acopladas ao transporte de contaminantes nas fases líquida e sólida foram resolvidada através da técnica de volumes finitos, Patankar (1985). As equações discretizadas foram resolvidas através do algoritmo tridiagonal com método de varredura linha por linha, Patankar (1985).

Utilizando-se o código computacional desenvolvido em Linguagem Fortran 90/95, Castro(2000) e de posse dos resultados experimentais obtidos por Ritter & Gatto (2003), foram realizadas simulações para reproduzir os ensaios de difusão visando a determinação das constantes do modelo. Em seguida, as equações de taxas de transferência de massa foram aplicadas ao ensaio de difusão molecular para reprodução do fenômeno de percolação de contaminantes inorgânicos em aterros.

3. Resultados e Discussões

Foram realizadas simulações em duas fases distintas: 1) Validação do modelo e 2) ajuste de constantes – nesta fase foi simulado o ensaio de difusão.

Pinto (2004) também utilizou os mesmos dados experimentais para simular a difusão molecular. Os resultados obtidos foram comparados com as simulações realizadas por Ritter e Gatto em 2003, utilizando o POLLUTE.

Os valores dos coeficientes de difusão molecular dos íons utilizados foram aproximados dos valores encontrados para os mesmos íons em solução aquosa a 25°C extraídos da literatura (Lerman, 1979). A Tabela 1 apresenta estes valores de coeficiente de difusão livre (D_0).

Tabela 1 – Valores de D_0 para os cátions K^+ e NH_4^+ em solução aquosa a 25°C.

ÍON	D_0 (m ² /ano)
K^+	0,062
NH_4^+	0,062

Fonte: LERMAN (1979)

A Tabela 2 apresenta uma comparação entre os valores de coeficiente de difusão efetivo (D_e). São comparados os valores utilizados nas simulações realizadas nesta pesquisa, considerando um modelo da cinética de transferência de massa e os coeficientes utilizados por Pinto (2004) e Ritter e Gatto (2003) (através do POLLUTE), considerando um modelo baseado na sorção da espécie química, modelado a partir das isotermas de sorção.

Tabela 2 – Valores de D_e para os cátions K^+ e NH_4^+ utilizados nas simulações realizadas em 2005, 2004, e 2003.

ÍON	D_e (m ² /ano) ^(a)	D_e (m ² /ano) ^(b)	D_e (m ² /ano) ^(c)
K^+	0,010	0,020	0,020
NH_4^+	0,020	0,010	0,070

^a Valores de D_e utilizados nas simulações realizadas neste trabalho (2006); ^b Valores de D_e utilizados por Pinto (2004); ^c Valores de D_e utilizados por Ritter e Gatto (2003), para simulação através do POLLUTE.

Na Tabela 3, estão apresentados os valores da constante cinética k , da concentração de equilíbrio C_{eq} e do coeficiente n de ordem de equação para cada espécie química simulada. Os valores para k e n foram definidos de acordo com os ajustes obtidos entre as curvas da simulação e os pontos experimentais. E os valores para C_{eq} foram determinados em função das concentrações dos íons contidas nos interstícios da amostra de solo.

TABELA 3 – Valores de k , C_{eq} e n considerados na simulação computacional.

ÍON	k	C_{eq} (mg/l)	n
K^+	1,05*10 ⁻⁵	434,4	1,32
NH_4^+	2,5*10 ⁻²	754,4	1,75

Foram realizados ajustes finos nos coeficientes k , C_{eq} e n , da equação modelada para que esta convergisse de modo a refletir os dados obtidos experimentalmente.

Os ensaios de difusão molecular foram realizados por Ritter e Gatto (2003), e os resultados obtidos foram utilizados como dados para a simulação computacional. O ensaio de difusão molecular foi realizado na célula modelo Barone et al. (1989) com 10 cm de diâmetro. A célula foi montada com 5 cm de solo e acima deste chorume até atingir um nível de 5 cm, denominado reservatório (Figura 2). O ensaio de difusão durou 3 dias; este tempo foi definido após ensaios prévios (Ritter et al, 2001), variando o período em 3, 5 e 7 dias. Ao final do ensaio a amostra foi fatiada, e o líquido intersticial de cada fatia extraído através do equipamento na prensa pneumática para análise química.

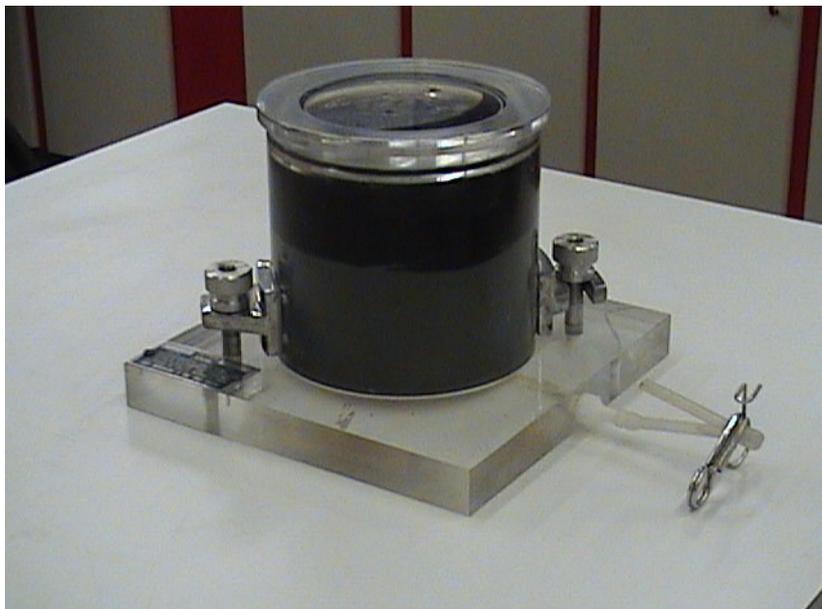


Figura 2: Célula conforme o modelo de Barone, contendo as amostras de solo e de chorume.

Nas figuras 3 e 4 estão apresentados os gráficos dos perfis de difusão molecular para os íons K^+ e NH_4^+ presentes no chorume, através do reservatório e da amostra de solo, ambos contidos na célula experimental por um período de ensaio de 72 horas (Ritter e Gatto, 2003).

Na parte superior da célula, reservatório de chorume, a difusão dos íons ocorre em solução livre. Já na amostra de solo ocorre a difusão efetiva dos íons através dos interstícios das partículas sólidas devido aos efeitos da tortuosidade e da porosidade.

Os gráficos mostram os valores das concentrações presentes inicialmente no reservatório de chorume e na amostra de solo.

Os valores das concentrações obtidas durante os ensaios experimentais estão representados pelos quadrados, presentes nos gráficos. A linha tracejada e pontilhada representa os dados numéricos obtidos através da simulação utilizando-se o POLLUTE; a linha tracejada, os dados numéricos obtidos através da simulação realizada por PINTO (2004) utilizando o mesmo programa em linguagem fortran utilizado neste trabalho. A linha contínua representa os dados numéricos obtidos, porém com o cálculo do termo fonte baseado na equação da cinética de transferência de massa.

As linhas (1), (2) e (3) representam respectivamente, a concentração inicial do íon no reservatório, a concentração inicial do íon na amostra de solo e a interface entre o reservatório e a amostra de solo.

A simulação realizada através do programa MPHMTM permite que a interface entre a amostra de solo e o reservatório de chorume sobre ela seja parte integrante do domínio de cálculo, onde a solução numérica reproduz as camadas limites de difusão na região de interface. Na modelagem com o programa POLLUTE, a interface entre o reservatório de chorume e a amostra de solo demanda a especificação de uma condição de contorno, geralmente fixa, que pode não reproduzir perfeitamente a dinâmica da troca de massa entre as duas regiões. A transferência de massa calculada pelo modelo do programa utilizado pode ser observada através da variação de concentração no reservatório de chorume acima da amostra de solo, o que não é calculado pelo modelo POLLUTE (Ritter & Campos, 2006).

Na parte superior da célula experimental, onde está contido apenas chorume, ocorrem os processos de difusão e advecção. Na parte inferior, a transferência de massa entre os íons do chorume e as partículas de solo acontece devido à ação simultânea dos fenômenos de difusão molecular, sorção e advecção.

A partir do gráfico da Figura 3, é possível observar o bom ajuste da curva obtida pelo neste estudo através do modelo cinético com os dados experimentais para o íon K^+ , quando comparados com o programa POLLUTE e com o modelo sorçivo apresentado por Pinto (2004). A linha inteira, a qual rrpresenta o modelo simulado, intercepta os três pontos obtidos experimentalmente, o que não é possível de ser observado tanto na simulação com o Pollute, quando na simulação realizada por Pinto (2004), ambas modeladas em isotermas de sorção. Então é possível verificar que o modelo baseado no fenômeno de transferência de massa, representa com melhor fidelidade os resultados de tranporte de contaminantes obtidos nos ensaios de laboratório.

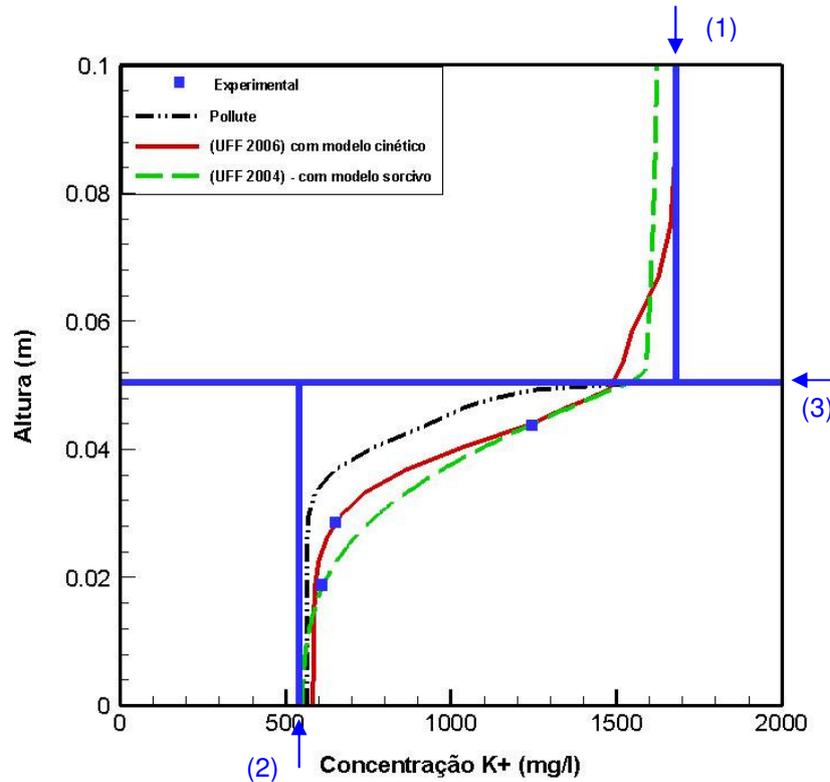


Figura 3 – Perfil da difusão molecular do K^+ , utilizando os resultados experimentais de 2003 (72 horas de ensaio).

A simulação para o íon NH_4^+ também apresentou um melhor ajuste com os dados experimentais quando considerado o modelo da cinética de transferência de massa, como pode ser verificado na Figura 4. A curva modelada intercepta três dos quatro pontos obtidos experimentalmente, e passa bem mais próximo do terceiro ponto quando comparado com as simulações modeladas nas isotermas de sorção. Novamente é possível verificar a melhor eficiência da simulação modelada a partir do fenômeno de transferência de massa.

Os valores dos coeficientes de difusão efetiva considerados para a simulação dos íons K^+ e NH_4^+ foram 16,13% e 32,25%, respectivamente, menores do que os valores do coeficiente de difusão em solução livre destes íons, em solução aquosa a 25°C, extraídos da literatura.

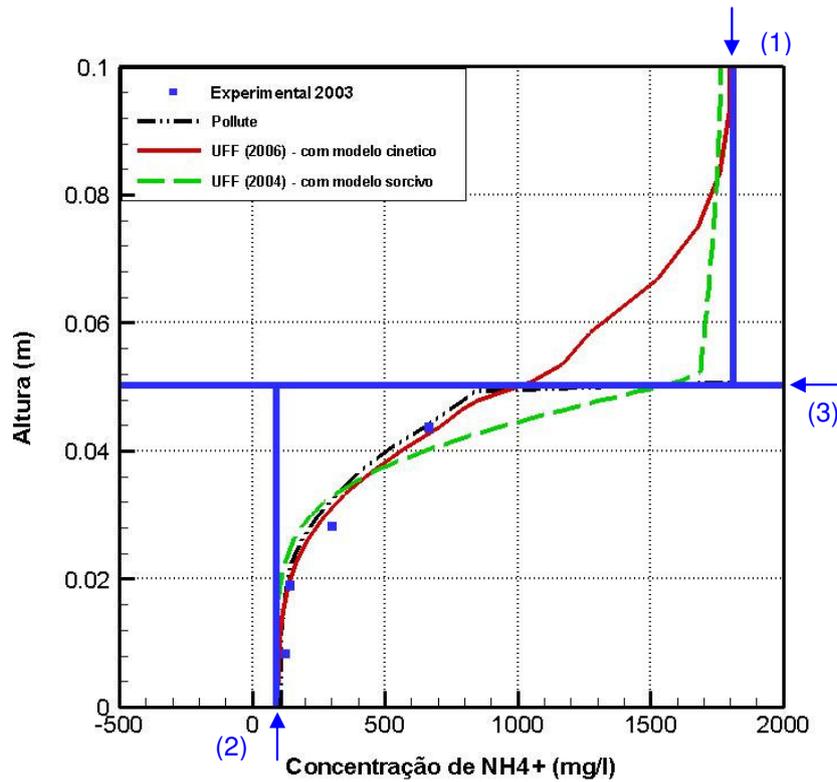


Figura 4 - Perfil da difusão molecular do NH_4^+ , utilizando os resultados experimentais de 2003 (72 horas de ensaio).

As figuras 5 e 6 abaixo, descrevem o comportamento da concentração dos íons K^+ e NH_4^+ no solo em função do tempo.

De acordo com a caracterização do solo do aterro em estudo (Ritter e Gatto, 2003), o valor da concentração inicial do íon K^+ no líquido intersticial do solo é 543 mg/L. O gráfico da Figura 5 mostra que esta concentração aumenta à medida que o tempo de contato entre o solo e o chorume se torna maior.

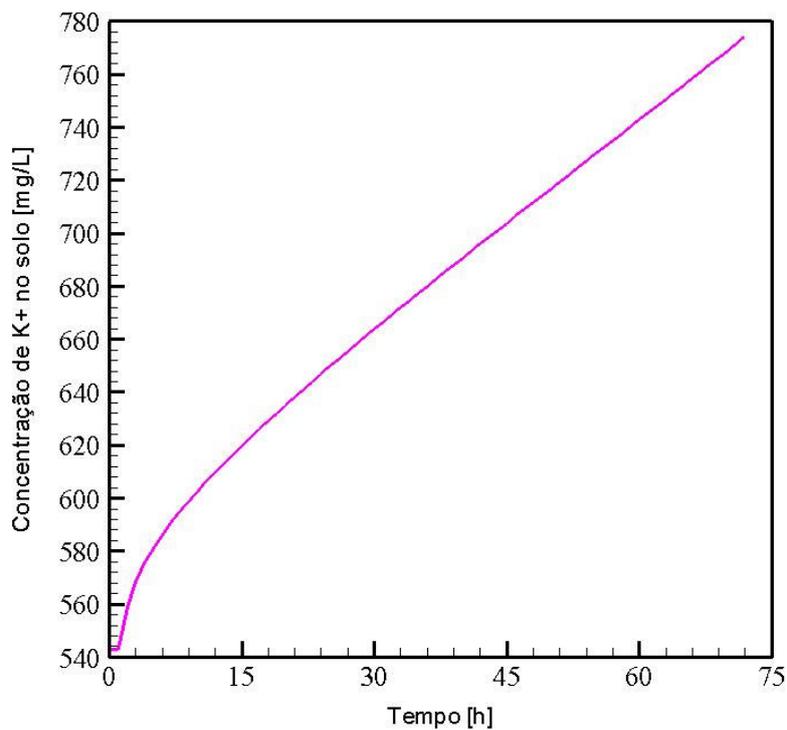


FIGURA - Gráfico da concentração x tempo do íon K^+ .

Do mesmo modo que o íon K^+ , a concentração do íon NH_4^+ (Figura 6) também aumenta no solo. Logo é possível observar, claramente, que estes dois íons, são transferidos do chorume para o solo, pois a concentração dos mesmos é maior no líquido do que nos interstícios do solo.

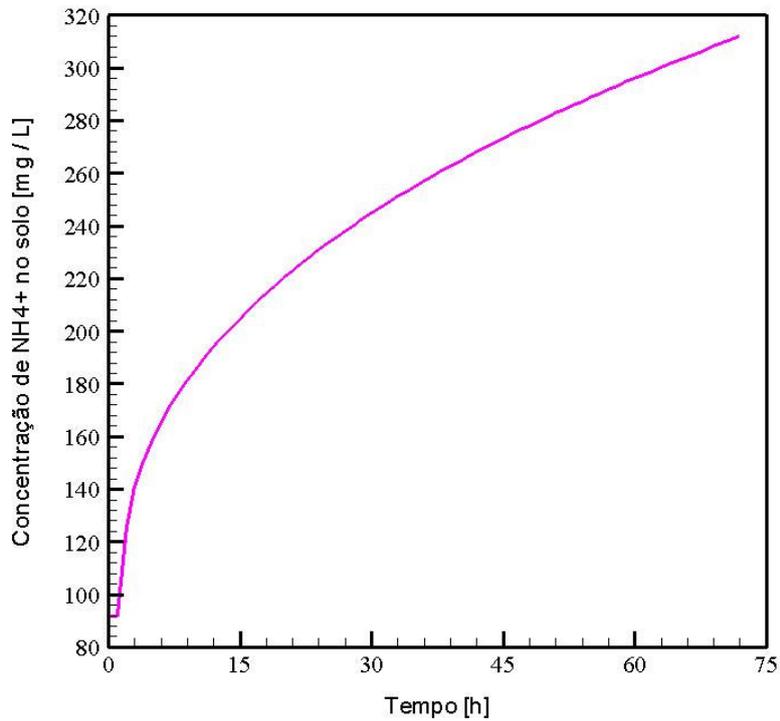


FIGURA 6 - Gráfico da concentração x tempo do íon NH_4^+ .

As Figuras 7 e 8 apresentam o comportamento da taxa de transferência de massa das espécies químicas K^+ e NH_4^+ em toda a célula de difusão (a) e em um ponto próximo à interface (b). Observa-se que no início do ensaio a taxa de transferência é alta, pois a área de contato solo/chorume é grande. Porém, à medida esta área diminui a taxa de transferência conseqüentemente diminui.

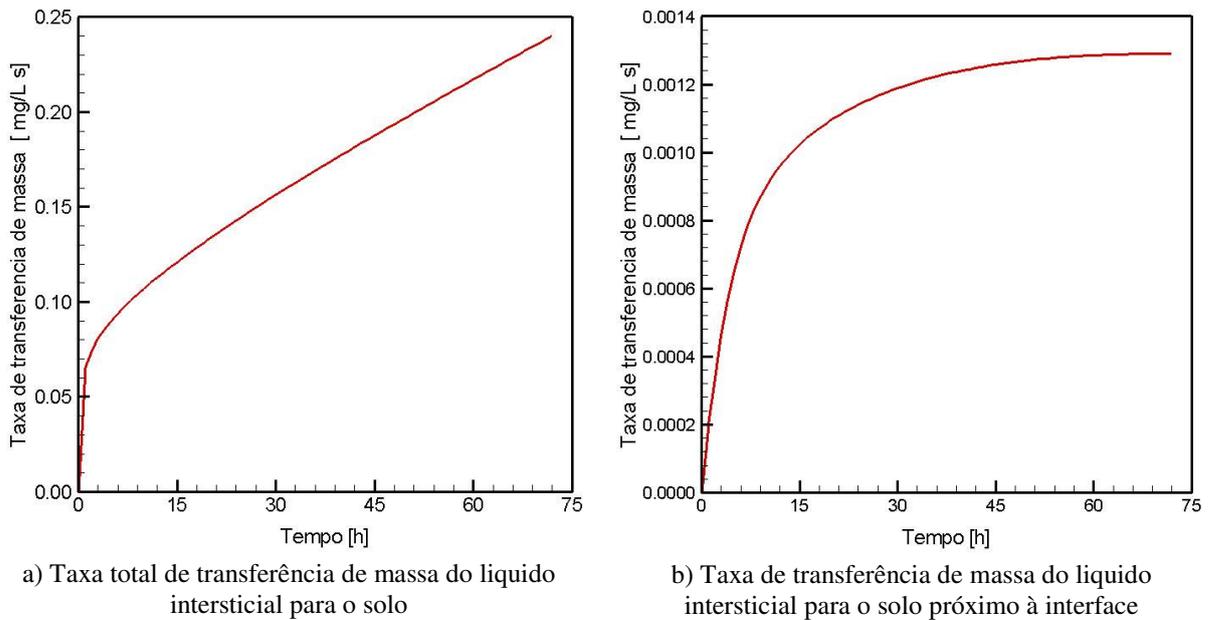


FIGURA 7 – Cinética de transferência de massa solo-chorume para o íon K^+ .

A figura 8 (a) representa taxa de transferência de massa do íon NH_4^+ em toda a célula de difusão. É possível verificar que ocorre uma rápida transferência deste íon no início do ensaio, ou seja, a fase sólida, solo, é rapidamente saturada em NH_4^+ . Na figura 8 (b) a taxa de transferência de massa é apresentada em um ponto da célula de difusão próximo à interface solo/chorume.

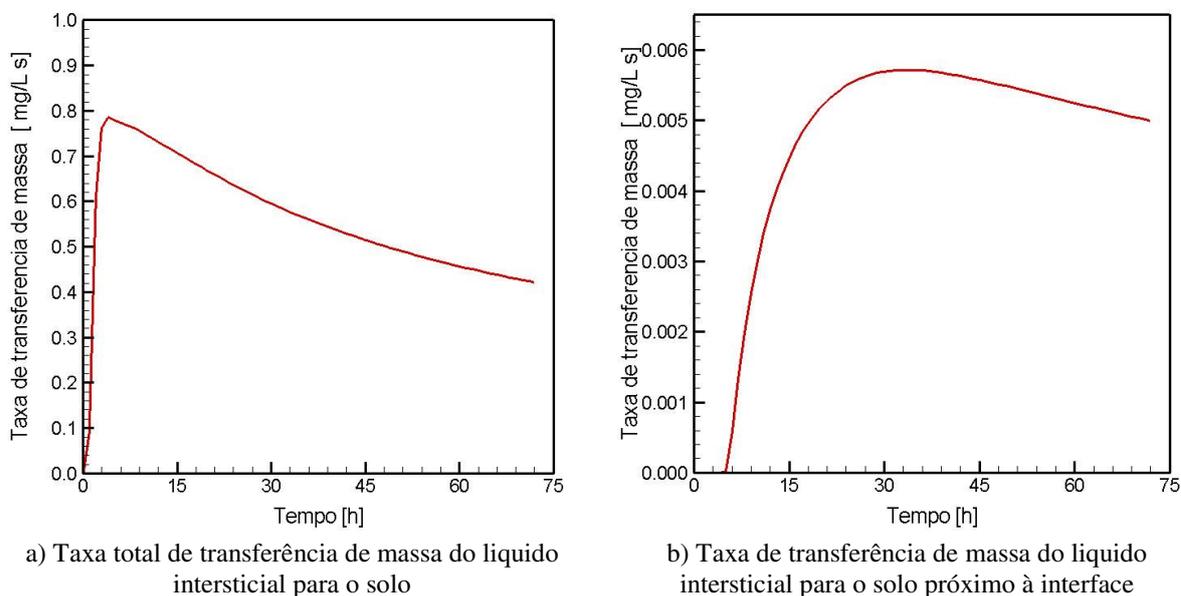


FIGURA 8 – Cinética de transferência de massa solo-chorume para o íon NH_4^+ .

4. Conclusões

Um código computacional capaz de prever o comportamento do fenômeno de transferência de massa de contaminantes inorgânicos encontrados nos chorumes de aterros foi desenvolvido e validado. Como base de estudo foram selecionados os contaminantes potássio e amônio que possui características de média a forte taxa de sorção em solos arenosos. Os resultados demonstraram a forte não linearidade do comportamento das taxas de sorção, o que inviabiliza o uso de isotérmicas de sorção linear para a previsão do comportamento dos mesmos. Para ambos os contaminantes selecionados o modelo proposto mostrou-se eficiente para a previsão do comportamento do transporte de transferência de massa para os testes de difusão molecular. Resultados experimentais mostram que mudanças bruscas na tangente dc/dt devem ser explicadas através das mudanças de mecanismos de transferência.

Para os íons estudados, foi observada uma melhor aproximação entre os valores experimentais e os simulados, quando considerado o modelo de transferência de massa. Este fato é atribuído ao grau de liberdade existente na equação modelada, pois existem vários parâmetros a serem trabalhados, ao contrário do modelo baseado nas isotérmicas de sorção da espécie química, onde só se trabalha com o coeficiente de distribuição (k_d) e o coeficiente de difusão (D_0).

Os resultados da simulação realizada neste trabalho mostraram que o processo de migração dos íons inorgânicos do chorume no solo ocorre por três mecanismos fundamentais: advecção e difusão na fase líquida (chorume), sorção na interface solo/chorume e difusão no líquido contido no interior da partícula do solo. Somente a difusão molecular e a sorção não representam com fidelidade os valores experimentais obtidos, sendo então possível comprovar que ocorre também o fenômeno de transferência de massa dos íons do contaminante e do líquido intersticial do solo para a própria partícula do solo, e vice-versa.

5. Agradecimentos

Os autores agradecem ao **CNPq** e **CAPES** por incentivar e fomentar o desenvolvimento científico e tecnológico nacional.

6. Referências

- Barone, F.S.; Yanful, E.K.; Quigley R.M. & Rowe, R.K. Effect of multiple contaminant migration on diffusion and adsorption of some domestic waste contaminants in a natural clayey soil. *Canadian Geotechnical Journal*, v. 26, p. 189-198, 1989.
- Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N. 2002. *Transport Phenomena*, 2nd ed., John Wiley and Sons, New York, NY, USA, p. 114-140.
- Castro, J. A. 2000. A multi-dimensional transient mathematical model of blast furnace based on multi-fluid model. Institute for Advanced Materials Processing. Tohoku University, Japan, 150 p.
- Gaskell, D.R. 1992. An Introduction to transport phenomena in Materials Engineering, Macmillan Publishing Company, New York, NY, USA, p. 522-598.
- Leite, A.L. 2001 Migração de Ions Inorgânicos em Alguns Solos Tropicais, com Ênfase nos Processos de Sorção e Difusão Molecular, Tese de Doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.
- Oeters, F. 1994. *Metallurgy of Steelmaking*, Stahleisen, Berlin, Germany, p. 155-157.
- Patankar, S.V. 1985. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Company, Washington, USA, 197 p.
- Perry, R. H. e Green, D. 1985. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, Sixth edition. McGraw-Hill Publish Company. New York, NY, USA, p. 16-21 – 16-32.
- Pinto, I.C.R. Modelamento e simulação computacional da migração dos íons do chorume em meio poroso. 2004. 81 f. Dissertação de Mestrado - Programa de Pós Graduação em Engenharia Metalúrgica. Universidade Federal Fluminense. Volta Redonda, 2004.
- Poirier, D.R. and Geiger, G.H. 1994. *Transport Phenomena in Materials Processing*, TMS, 509 p.
- Ritter, E.; Leite, A E.B. & Machado, V.F. Avaliação da capacidade de mitigação da argila orgânica presente na fundação e nas valas de contenção lateral para o chorume gerado no Aterro Metropolitano de Gramacho – Rio de Janeiro. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL, 2001, João Pessoa, Brasil. Anais do XXVII Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental. João Pessoa, 2001, 9 p., Cd-Rom.
- Ritter, E. & Gatto, R. Relatório Interno (PIBIC/UERJ). 2003.
- Ritter, E. & Campos, J.C. Avaliação da Sorção e Difusão Molecular de Íons Inorgânicos do Chorume e da Argila Orgânica do Aterro Metropolitano de Gramacho (RJ). *Solos e Rochas*, v.29, I.1, p. 77-88, 2006.
- Slattery, J. C. 1999 *Advanced Transport Phenomena*, Cambridge University Press, USA, capítulos 8 e 12.
- Yagi, J.I. Mathematical Modeling of the Flow of Four Fluids in a Packed Bed. *ISIJ International*, v. 33, n. 6, p. 619-639, 1993.
- Lerman, A. *Geochemical process. Water and sediment environments*. New York: John Wiley & Sons, 1979. 481 p.

MODELING THE MASS TRANSFER OF INORGANIC IONS OF THE LEACHATE IN THE LANDFILL

Adriana de Souza Forster Araújo

Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta.

Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ

adriana@metal.eeimvr.uff.br

José Adilson de Castro

Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta.

Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ

adilson@metal.eeimvr.uff.br

Alexandre José da Silva

Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta.

Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ

ajs@metal.eeimvr.uff.br

Elizabeth Ritter

Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Departamento de Engenharia Sanitária e do Meio Ambiente, UERJ, Rua São Francisco Xavier, 524/5029-F Maracanã - 20550-900 - Rio de Janeiro - RJ

ritter@uerj.br

Abstract

The present work consists of the development and validation of a model to predict the dynamics of inorganic ions, ammonium and potassium, in landfill ground. The model is based on the simultaneous solution of motion and ions transport of the leachate in the porous media. The mass transfer phenomenon is modeled by using rate equations of mass transfer coupled to the transport equations of the contaminants. The set of partial differential equations describing the coupled phenomena are discretized based on the finite volume method. Experimental results of diffusion tests are used to validate the numerical procedure. The rate equations for the mass transfer of the inorganic ions were formulated taking into account the following mechanism: 1) transport of the ions in the leachate from the bulk to the surface of the particle; 2) sorption/desorption of the ions in the particle surface and 3) diffusion of the ions within the liquid in the interior of the soil particle. By using the analogy of series resistance the rate equation of the ions transfer were determined. The results obtained by adjusting the model parameters for the rate transfer showed excellent agreement with the experimental measurements in the laboratory scale, which enables the model to be applied to predict the landfill contamination.

Keywords: *Computational modeling, Sorption kinetic, Leachate.*