



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL DO SEMIÁRIDO
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA DE BIOTECNOLOGIA E BIOPROCESSOS
CURSO DE ENGENHARIA DE BIOTECNOLOGIA E BIOPROCESSOS**

ANDREZA LARISSA PIRES MORAIS

**ESTUDO NUMÉRICO DO COMPORTAMENTO DA PLUMA DO SULFATO
DE SÓDIO, FORMADO A PARTIR DA REAÇÃO DE UM ÁCIDO COM
UMA BASE DECORRENTE DE UM VAZAMENTO EM SOLO SATURADO.**

**SUMÉ - PB
2019**

ANDREZA LARISSA PIRES DE MORAIS

**ESTUDO NUMÉRICO DO COMPORTAMENTO DA PLUMA DO SULFATO
DE SÓDIO, FORMADO A PARTIR DA REAÇÃO DE UM ÁCIDO COM
UMA BASE DECORRENTE DE UM VAZAMENTO EM SOLO SATURADO.**

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos do Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharela em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos.

Orientador: Professora Dr^a. Fabiana Pimentel Macêdo Farias.

**SUMÉ - PB
2019**

M827e Morais, Andreza Larissa Pires de.

Estudo numérico do comportamento da pluma do sulfato de sódio, formado a partir da reação de um ácido com uma base decorrente de um vazamento em solo saturado. / Andreza Larissa Pires de Morais. - Sumé - PB: [s.n], 2019.

57 f.

Orientador^a: Prof^a. Dr^a. Fabiana Pimentel Macêdo Farias.

Monografia - Universidade Federal de Campina Grande; Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido; Curso de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos.

1. Contaminação do solo. 2. Fluidos contaminantes do solo. 3. Águas subterrâneas contaminação. 4. Dinâmica de fluidos computacional – CFD. 5. Contaminantes ácidos – solo. 6. I. Farias, Fabiana Pimentel Macêdo.

CDU: 631.4 (043.1)

Elaboração da Ficha Catalográfica:

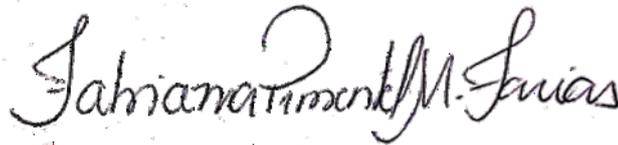
Johnny Rodrigues Barbosa
Bibliotecário-Documentalista
CRB-15/626

ANDREZA LARISSA PIRES DE MORAIS

**ESTUDO NUMÉRICO DO COMPORTAMENTO DA PLUMA DO SULFATO
DE SÓDIO, FORMADO A PARTIR DA REAÇÃO DE UM ÁCIDO COM
UMA BASE DECORRENTE DE UM VAZAMENTO EM SOLO SATURADO.**

**Monografia apresentada ao Curso de Graduação
em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos do
Centro de Desenvolvimento Sustentável do
Semiárido da Universidade Federal de Campina
Grande, como requisito parcial para obtenção do
título de Bacharela em Engenharia de
Biotecnologia e Bioprocessos.**

BANCA EXAMINADORA



**Dra. Fabiana Pimentel Macêdo Farias.
Orientadora - UATEC/ CDSA/ UFCG**



**Prof. Dr. Bruno Rafael Pereira Nunes
Examinador I - UAEB/ CDSA/ UFCG**



**Dra. Débora Rafaelly Soares Silva
Examinador II - UATEC/ CDSA/ UFCG**

**Aprovado em 11 de dezembro de 2019,
SUMÉ - PB.**

A minha mãe Luiza Pinto Morais e meu pai Antonio Auricio Pires. Por todo o apoio e suporte durante essa jornada. A todas as pessoas que tive o prazer de conhecer e conviver durante essa jornada chamada vida. *DEDICO.*

AGRADECIMENTOS

É difícil agradecer a todas as pessoas que de alguma forma, nos momentos de serenidade, de felicidade, e nos apreensivos, à distância ou fisicamente, fizeram parte deste importante ciclo, marcado por muito aprendizado, descobertas, medos, problemas e superação. Por essa razão, aos que não pude citar, sintam-se queridos e abraçados.

A aquele comigo em todas as horas, meu grande amigo e conselheiro, Deus. Gratidão por nunca ter soltado minha mão, por ter enxugado as minhas lágrimas, me proporcionado toda essa garra e força de vontade para superar todas as situações difíceis. Obrigado por todos os dias me fornecer a disposição necessária para conquistar o mundo e um bom coração para sempre respeitar o próximo.

Aos meus pais Luiza Pinto Morais e Antonio Auricio Pires, por serem tão maravilhosos comigo. Obrigada por todo amor, dedicação, paciência e por sempre acreditarem em mim. Vocês são os responsáveis por todas as minhas conquistas. Amo vocês!

As minhas amadas madrinhas, Lucineide de Oliveira e Maria Alcides. Vocês são as outras duas mães com as quais a vida me presenteou.

As minhas outras duas mães emprestadas Amannda Souza Silva e Caroline Freitas, agradeço. Deus sabe que faz 5 anos que amo vocês incondicionalmente, conheci assim que cheguei a Sumé e nunca mais larguei. A Rita de Cássia, por ser uma mãe com a qual Sumé me presenteou. Aos meus companheiros de casa por tanto tempo, Maxsuel Leal, Crisóstomo Trajano e Keila Mayara Milka, agradeço.

Aos meus irmãos, em especial a minha irmã mais velha, Maria Aurissângela Pires Bezerra Coelho, agradeço.

Aos dois irmãos com os quais a vida me presentou desde de muito nova, Gabriel Ferreira da Silva e José Victor Pinheiro Neto, agradeço.

A minha prima Jessica Talita de Oliveira e ao meu tio Antonio Aureliano de Oliveira, agradeço. Obrigado por todos o apoio que vocês me ofereceram ao logo da minha jornada.

Aos meus amigos ANORMAIS, Caio Azevedo, Tacia Albuquerque, Kamila Sotero, Davi Neves, Marco Antonio, Rainy, Taliana Samara, Maria Alice de Melo e José Carlos. Em vocês eu encontrei tudo que precisava para me completar. Cada um me ensinou algo que hoje em dia compõem a minha pessoa. Encontrei amor, acolhimento, compreensão, cuidado, paciência, amor, achei eternos companheiros de farra e militantes das causas importantes da vida.

As mulheres maravilhosas da turma de 2014 de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, agradeço. Antonia Isadora, Camila Joyce, Dayse Freitas, Jayane Karine, Katia Cristina, Luana Maria, Maria Alice, Maria Suenia, Sabrina Sousa, obrigado por cada momento compartilhado.

A família que Sumé me forneceu, Sabrina Sousa, Maria dos Milagres e Sandro José, agradeço. Vocês me deram um lar, uma casa, comida e amor. Dayana Danubia, Ester Hellen, Maria Suenia, e Sabrina Sousa vocês são preciosos presentes que a Paraíba me deu, agradeço por tudo.

Ao meu amigo Mayk Bezerra, um grande companheiro para todas as horas, agradeço.

As minhas companheiras de casa e de vida, Danielle Ferreira e Graciele Santana, agradeço por cada momento, cada lágrima e cada briga. Meninas obrigado pelo Osmar Antonio também, sempre tão divertido e de bom coração. Ao meu amigo Pedro Bassani, agradeço pelo companheirismo em tantos momentos.

Aos meus amigos e companheiros todos os tipos de rolês, Isadora Guedes, Edson Salvador, Mariana Paiva e Ariadne Guerra, agradeço. Vocês chegaram de mansinho e levaram meu coração de assalto, tão chatos mas sempre tão companheiros, agradeço.

A todas as pessoas que eu convivi no Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido, aos meus professores. Mas especialmente a essas lindas e maravilhosas que me orientaram nessa caminhada Aldinete Barreto, Ilza Maria do Brasileiro Nascimento, Ana Verônica, Glauciane Danusa Coelho e Fabiana Pimentel Mâcedo de Farias. Cada uma de vocês me ensinou uma lição importante, me orientou e cuidou de mim, foram os cinco anos mais prazerosos da minha vida. Um agradecimento especial ao professor Severino Neto, pela orientação e paciência.

Aos professores Bruno Rafael Pereira Nunes e Débora Raffaely Soares Silva por participarem da banca examinadora e dividir comigo um momento tão importante e esperado.

“Cause in my head (Porque na minha cabeça)

Nothing’s too hard (Nada é tão difícil)

We fight for us (Lutamos por nós)

And we never give up (E nunca desistimos)

In my head” (Na minha cabeça)

(David Guetta)

RESUMO

A contaminação de solos e / ou águas subterrâneas por fluidos com alto potencial poluente tem despertado interesse científico, principalmente em relação aos impactos ambientais causados ao meio ambiente. O conhecimento das características do solo e dos fluidos contaminantes contribui para a compreensão dos fenômenos físicos envolvidos durante o escoamento e dispersão dos contaminantes no solo. Assim, a dinâmica dos fluidos computacional (CFD), aliada ao conhecimento dos mecanismos de transporte de contaminantes no solo (difusão e / ou convecção) e ao grau de saturação, é uma ferramenta importante que auxilia na quantificação do impacto ambiental causado, indicando a região onde as ações para remediar o meio devem ser concentradas. O vazamento de ácido pode ser remediado por uma reação neutralizante com o auxílio de uma base geradora de sal. Em vista do exposto, o estudo do comportamento do sal formado (sulfato de sódio) foi realizado a partir da reação de neutralização de um ácido (ácido sulfúrico) por uma base (hidróxido de sódio). Foi assumido o modelo de fluxo monofásico e multicomponente, regime turbulento, não isotérmico, domínio bidimensional e com o solo inicialmente saturado com água ($\text{pH} = 7$). Todas as simulações foram realizadas com o pacote comercial ANSYS CFX[®] 15.0. Os resultados da simulação permitiram visualizar a distribuição do pH no solo saturado e os perfis de ácido, base e sal. De maneira geral, observou-se que o aumento da velocidade da água no solo promove um avanço na dispersão das substâncias (ácido, base e sal produzidos). No entanto, o impacto causado pelo sal produzido no solo é baixo devido à sua baixa concentração.

Palavras-chave: Meio Poroso. Vazamento e Meio Ambiente.

ABSTRACT

Contamination in soils and / or groundwater by fluids with high pollutant potential has been arousing scientific interest, especially in relation to environmental impacts caused to the environment. Knowledge of soil characteristics and contaminant fluids contributes to the understanding of the physical phenomena involved during runoff and dispersion of contaminants in the soil. Thus, computational fluid dynamics (CFD), coupled with knowledge of the mechanisms of transport of contaminants in the soil (diffusion and / or convection) and the degree of saturation, is an important tool that helps in quantifying the environmental impact caused, indicating the region where actions for the remediation of the medium should be concentrated. Acid leakage can be remedied by a neutralizing reaction with the aid of a base generating a salt. In view of the above, the study of the behavior of the salt formed (sodium sulfate) was carried out from the neutralization reaction of an acid (sulfuric acid) by a base (sodium hydroxide). It was assumed the one-phase and multicomponent flow model, turbulent, non-isothermal regime, two-dimensional domain and with the soil initially saturated with water (pH = 7). All simulations were performed with the ANSYS CFX[®] 15.0 commercial package. The simulation results allowed the visualization of the pH distribution in the saturated soil and the acid, base and salt produced profiles. In general, it was observed that increasing the velocity of water in the soil provides an advance in the dispersion of the substances (acid, base and salt produced). However, the impact caused by salt produced in the soil is low due to its low concentration.

Keywords: Porous medium, Leakage and Environment.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades físico-químicas da Água.....	38
Tabela 2 – Propriedades físico-químicas do Ácido Sulfúrico.....	38
Tabela 3 – Propriedades físico-químicas do Hidróxido de Sódio.....	38
Tabela 4 – Propriedades físico-químicas do Sulfato de Sódio.....	38

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Processos envolvidos no transporte de contaminantes.....	20
Quadro 2 – Casos Estudados.....	39

ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ANA	Agência Nacional das Águas
CETESB	Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
CFD	<i>Computacional Fluid Dynamics</i>
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
LCTF	Laboratório Computacional em Térmica e Fluidos
LFPI	Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem
MDIC	Ministério da Economia Indústria, Comércio Exterior E Serviços
MMA	Ministério do Meio Ambiente
NBR	Norma Técnica

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas

k	Permeabilidade	[m ²]
P	Pressão	[Pa]
D	Coefficiente de difusão	[m ² s ⁻¹]
X _i	Distância longitudinal na direção i	[m]
J _i	Fluxo difusivo de massa na direção i	[kg m ² s ⁻¹]
v _i	Velocidade intersticial do fluido	[m s ⁻¹]
C	Concentração	[kg m ⁻³]

Letras Gregas

<i>v</i>	Velocidade de Darcy	[m s ⁻¹]
ϕ	Porosidade	[-]
ρ	Massa específica	[kg m ⁻³]
μ	Viscosidade dinâmica do fluido	[Pa s]

SUMÁRIO

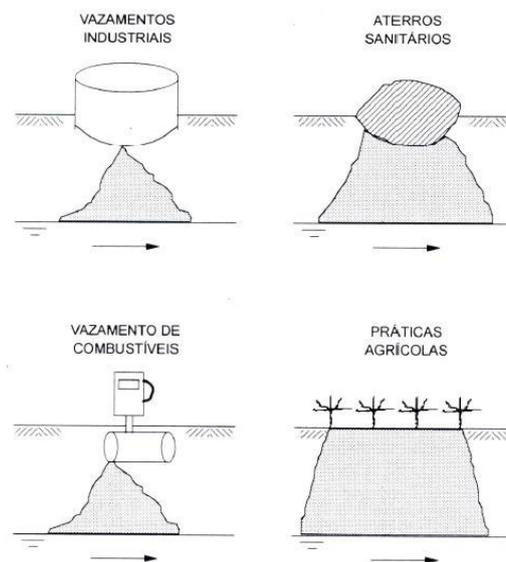
1 INTRODUÇÃO.....	15
1.1 OBJETIVO GERAL.....	17
1.1.1 Objetivos Específicos	17
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	18
2.1 SOLO: ASPECTOS GERAIS	18
2.1.1 Mecanismos de Transporte de Contaminantes no Meio Poroso	19
2.2 ÁGUAS SUBTERRÂNEAS	23
2.3 CONTAMINAÇÃO DO SOLO E DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS	24
2.3.1 Contaminação do solo e das águas subterrâneas por derramamento de contaminantes ácidos	25
2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	27
2.5 APLICAÇÕES DOS MECANISMOS DE TRANSPORTE DE POLUENTES NO SOLO	28
3 METODOLOGIA	31
3.1 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA	31
3.1.1 Malha Computacional	32
3.2 MODELAGEM MATEMÁTICA.....	33
3.2.1 Condições Iniciais e de Contorno	36
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	40
4.1 ANÁLISE QUALITATIVA.....	40
4.2 ANÁLISE QUANTITATIVA	47
5 CONCLUSÃO.....	52
5.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	52
REFERÊNCIAS.....	53

1 INTRODUÇÃO

A contaminação do solo e das águas subterrâneas por resíduos tóxicos é uma preocupação constante, uma vez que provoca danos ao meio ambiente. Há diversas fontes de contaminação, como por exemplo: fontes projetadas para descarga de substâncias (fossas sépticas e poços de injeção); fontes projetadas para armazenar, tratar e/ou dispor substâncias que a descarga acontece por vazamento (aterros sanitários, lagoas de decantação, pilhas de resíduos e barragens de rejeitos); fontes projetadas para o transporte de substâncias (oleodutos, tubulações, vazamentos durante o transporte por meio rodoviário, ferroviário e marítimo); fontes que descarregam substâncias como consequência de outras atividades (práticas de irrigação, aplicações de pesticidas e fertilizantes, drenagem de mineração e drenagem urbana); fontes que induzem uma alteração no padrão de fluxo da água subterrânea (poços de produção e escavações subterrâneas); e por fim, fontes que ocorrem naturalmente e que podem ser influenciadas pela ação do homem (interação entre a água superficial e subterrânea, intrusão de água salgada, lixiviação/infiltração natural). Estas fontes podem atuar isoladamente ou juntas (FETTER, 1993; DEMUELENAERE, 2004).

Alguns exemplos dos mecanismos de contaminação da água subterrânea são mostrados na Figura 1.

Figura 1 – Exemplos de mecanismos de contaminação de água subterrânea.



Fonte: Gusmão (1999).

Para minimizar esses danos, recorre-se ao desenvolvimento de ações para a recuperação e proteção dessas áreas, visando garantir a sua preservação e conservação. As atividades que desencadeiam esse problema estão em ritmo acelerado, maximizando os impactos ambientais e, conseqüentemente, na saúde pública. No entanto, a contaminação do solo e das águas subterrâneas vem despertando cada vez mais o interesse dos cientistas, das empresas e governos, visto que essa contaminação se dá de forma crescente devido à expansão populacional em cadeia com a necessidade de consumo e, conseqüentemente, do aumento das atividades industriais.

O conhecimento das características do solo e dos fluidos, tais como porosidade, permeabilidade, saturação, capilaridade, concentração, distribuição de velocidade e pressão, entre outros, possibilitam o estudo do transporte dos poluentes (comportamento da dispersão da pluma) no solo, que é de fundamental importância para saber se a mesma atingirá ou não o lençol freático. Além disso, o conhecimento do tempo que esta pluma poderá atingir o aquífero, bem como a quantificação da concentração do contaminante, auxiliam no processo a ser adotado para a remediação ambiental. O poluente em contato com o solo permeia a zona insaturada proporcionando uma frente de avanço que pode contaminar a região saturada sendo, portanto, necessário a remediação dos solos e aquíferos. Estas atividades podem ser realizadas em posições e tempos inapropriados devido à falta de conhecimento da distribuição espacial do poluente (DELLEUR, 1999; GÜNTHER, 2005; FAVERO *et al.*, 2007).

Os ácidos e bases são alguns desses contaminantes que vem despertando interesse nas comunidades científica, industrial ou agrícola. Um meio para eliminar ou minimizar o efeito destes contaminantes especificamente em solos é a remediação por meio de reações de neutralização. Essas reações ocorrem ao reagirem por exemplo um ácido com uma base, tendo geralmente como produto um sal, um contaminante menos agressivo ao solo (FOGAÇA, 2018).

Neste sentido, a fluidodinâmica computacional (CFD), aliada ao conhecimento dos mecanismos de transporte dos contaminantes no solo (difusão e/ou convecção) e ao grau de saturação, passa a ser uma ferramenta importantíssima na obtenção de informações para auxiliar a estimativa do prejuízo ambiental causado pelo contaminante, além de ser uma ferramenta que promove uma economia financeira e temporal na tomada de decisão de qual técnica de remediação é mais adequada. Estas informações são, por exemplo, os campos de velocidade dos contaminantes, campos de pressão, pH do solo, concentração dos contaminantes e sua frente de avanço tanto na horizontal como na vertical, em duas ou três dimensões, atingida pelo contaminante no solo em função do tempo. Portanto, os conhecimentos destas informações

possibilitam o desenvolvimento de novas técnicas de remediação de solos e de águas subterrâneas.

1.1 OBJETIVO GERAL

Avaliar a neutralização, com hidróxido de sódio (NaOH), do ácido sulfúrico (H_2SO_4) no solo decorrente do vazamento de um reservatório via fluidodinâmica computacional.

1.1.1 Objetivos Específicos

- Definir um modelo matemático capaz de prever a neutralização do ácido no solo saturado;
- Avaliar a influência da vazão do ácido, da base e da água sobre o comportamento do pH no solo saturado;

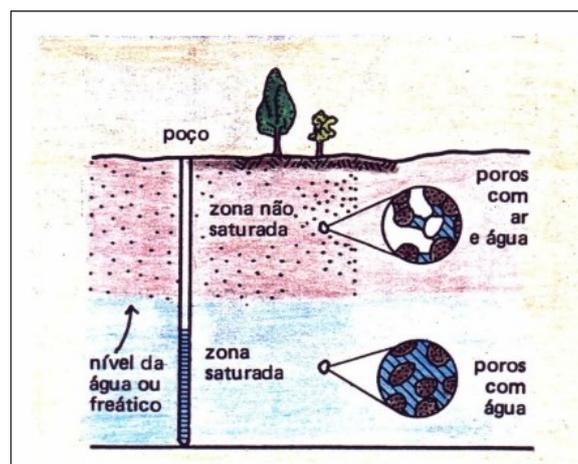
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 SOLO: ASPECTOS GERAIS

A ABNT (NBR 6502/1995) define solo como “Material sólido, consolidado e constituído por um ou mais minerais, com características físicas e mecânicas específicas para cada tipo”, o solo apresenta diferentes definições de acordo com o campo de estudo. Na geologia é definido como componente de uma sequência de eventos geológicos. Para o engenheiro de minas, ele é o material solto que deve ser removido para alcançar os minérios de interesse (SILVA et al., 2012). O solo é um meio heterogêneo, devido a ação simultânea e integrada do clima e dos organismos, sobre o seu material de origem (natureza mineral ou vegetal). Os processos que atuam sobre ele, como perdas, transformações, transportes e adições, são responsáveis pela transformação das rochas em solo, sendo este constituído por uma sucessão de camadas horizontais que diferem entre si na cor, granulometria, conteúdo orgânico, presença de minerais e organismos como vegetais, minhocas, insetos, fungos e bactérias (LIMA et al., 2007).

Quanto a presença de ar e água nas camadas do solo, existem duas denominações, chamadas de zona não-saturada e zona saturada (ver Figura 2). A zona não-saturada recebe essa denominação, pois água e ar ocupam os espaços vazios entre os grânulos no solo. Na zona saturada, a maior parte dos espaços vazios é preenchida por água (MMA, 2007).

Figura 2 – Zona não-saturada e saturada do subsolo.



Fonte: Sugahara.

As propriedades físicas, químicas e biológicas do solo são bastante variáveis e determinadas principalmente pela sua origem geológica e seu desenvolvimento no decorrer do

tempo. Outros fatores importantes para formação do solo, assim como de suas propriedades são o clima (precipitação e temperatura), o relevo local e a biota (vegetação natural, organismos vivos e crescentemente os seres humanos). Seguidamente, serão apresentadas algumas dessas propriedades (BRADY e WEIL, 2012).

As propriedades físicas do solo, como textura, estrutura, densidade, porosidade e permeabilidade são encarregadas pelos mecanismos de atenuação física de contaminantes, como filtração e lixiviação, influenciando ainda os processos de atenuação química e biológica (CETESB, 2013).

Das propriedades físicas apresentadas, duas destacam-se pela sua importância, referem-se à porosidade, que é definida como o volume de solo não ocupado por partículas sólidas e a permeabilidade, que representa a maior ou menor agilidade com que a água se movimenta através de seus poros vazios (FABBRIS et al., 2011). A permeabilidade é influenciada por alguns fatores que incluem a taxa de vazios, distribuição de poros e o grau de saturação do solo (ELHAKIM, 2016).

As propriedades químicas dos solos são, junto da atividade biológica, responsáveis pelos principais mecanismos de atenuação de poluentes nesse ambiente. Entre estes podem ser destacados a adsorção, a fixação química, precipitação, oxidação, troca e a neutralização que invariavelmente ocorrem no solo e através do manejo de suas propriedades podem ser incrementados. Essas propriedades incluem o potencial hidrogeniônico (pH), teor de nutrientes e de matéria orgânica, capacidade de troca catiônica (CTC) e a condutividade elétrica (CETESB, 2013).

2.1.1 Mecanismos de Transporte de Contaminantes no Meio Poroso

Nos problemas envolvendo a previsão e remediação dos impactos em áreas de deposição de resíduos, é necessário conhecer os mecanismos e parâmetros de transporte dos contaminantes envolvidos. A migração de contaminantes em meios porosos é regida por diversos processos. Os processos físicos compreendem fenômenos da advecção e dispersão hidrodinâmica, enquanto os processos químicos abrangem diversas reações que podem ocorrer entre a solução contaminante e o solo (DEMUELENAERE, 2004).

Para Boscov (1997), a contaminação do solo é o principal motivo de deterioração das águas subterrâneas. Os processos de contaminação no solo ocorrem lentamente e regularmente sem consequências mais sérias imediatas, porém a longo prazo podem ter consequências severas e irreversíveis. De acordo com Demuelenaere (2004), é possível que os contaminantes

estejam no estado líquido (efluentes) ou resultem da degradação ou percolação de águas pluviais por resíduos sólidos (chorume ou percolado).

Muitos são os fenômenos, alguns estão listados no Quadro 1 (GILHAM, 1987), que controlam o transporte e o acúmulo de contaminantes em meios porosos, no qual o soluto é alguma substância dissolvida (poluente), transportando-se com algum fluido (solvente) no meio poroso (VASCONCELOS, 2008).

Quadro 1 – Processos envolvidos no transporte de contaminantes.

Físico	Químico	Bioquímico
Advecção	Decaimento radioativo	Biodegradação
Dispersão		Biotransformação
Difusão molecular	Adsorção	
	Precipitação	
Retenção fluida	Coprecipitação	
Transporte coloidal	Oxirredução	
	Complexação	

Fonte: Gilham (1987).

2.1.1.1 Processos Físicos

A advecção é o processo físico no qual o soluto é transportado pelo fluido (água e ar) em movimento. Nesse transporte, os solutos não interagem com o meio poroso, a frente de contaminação é súbita e desloca-se a uma velocidade igual à velocidade de percolação do fluido (U), que é a força diretriz, sem que o seu pico de concentração seja alterado. A fração de contaminante transportada é função da concentração de solutos dissolvidos e da quantidade de fluxo do solvente. A velocidade de transporte em meio poroso é governada pela generalização da lei Darcy na forma diferencial e pode ser representada pela Equação 1 (ARÊAS, 2006; MIRANDA, 2004).

$$v = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial X_i} \quad (1)$$

Onde: v é a velocidade de Darcy ou velocidade superficial, k é a permeabilidade absoluta do meio poroso, μ é a viscosidade dinâmica do fluido, P é a diferença de pressão e X_i é a distância longitudinal na direção i .

Meio poroso é definido como fase sólida contínua que compreende muitos espaços vazios (poros) em seu interior. A porosidade frequentemente é uma propriedade isotrópica, logo a velocidade de percolação do fluido (U) relaciona-se com a velocidade superficial (v) pela Equação 2, a qual foi derivada de uma consideração de continuidade do fluido (RENHA, 2015).

$$U = \frac{v}{\phi} \quad (2)$$

Onde: U é a velocidade de percolação do fluido, v é a velocidade de Darcy ou velocidade superficial e ϕ é a porosidade.

Ou ainda, substituindo a Eq. 1 na Eq. 2, gerando a Eq. 3:

$$U = -\frac{k}{\phi \mu} \frac{\partial P}{\partial X_i} \quad (3)$$

O transporte advectivo unidimensional é dado pela Eq.4.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial X_i} \quad (4)$$

Onde: C é a concentração da massa do soluto na solução, U é a velocidade de percolação do fluido, t é o tempo e X_i é a distância longitudinal na direção i .

A determinação da equação acima citada requer que a velocidade de percolação do fluido (U) seja conhecida. Esta frequentemente é considerada a principal variável na análise de contaminação em um meio poroso (VASCONCELOS, 2008).

A dispersão hidrodinâmica (ou dispersão) em meios porosos é encarregada pela disseminação de contaminantes, e por consequência a sua diluição, ao longo de uma maior região do que seria previsto considerando que ocorresse apenas o fenômeno da advecção. A dispersão é função da variação da velocidade de percolação do fluido contaminante (PALMA e ZUQUETE, 2005; ZHENG e WANG, 1999).

A dispersão hidrodinâmica compreende duas componentes: a dispersão mecânica e a difusão molecular. Dessa forma, a variável que descreve a dispersão (D_H), conforme a Equação 5 (FREEZE e CHERRY, 1979).

$$D_H = D + D^* \quad (5)$$

Onde: D_H é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica, D é o coeficiente de dispersão mecânica e D^* é o coeficiente de difusão molecular do soluto no meio.

O fenômeno da dispersão mecânica causa um espalhamento do contaminante, em consequência das variações de velocidade do fluido no interior do meio poroso, sendo que esse depende da velocidade média de percolação e da dispersividade do meio poroso (NOBRE, 1987; OLIVEIRA, 2009). A variável que representa a dispersão mecânica (D) pode ser determinada através da Equação 6.

$$D = \alpha u \quad (6)$$

Onde: D é o coeficiente de dispersão mecânica, α é o coeficiente de mistura mecânica ou dispersividade, U é a velocidade de percolação do fluido.

Ou ainda, substituindo a Eq. 5 na Eq. 6, gerando a Eq. 7:

$$D_H = \alpha U + D^* \quad (7)$$

A difusão molecular é o processo através do qual os componentes iônicos e moleculares movem-se sob influência da energia cinética na direção do gradiente de concentração. Posteriormente ao estabelecimento do gradiente, visando o equilíbrio, os componentes tendem a se deslocar das regiões de maior concentração para as de menor. O fluxo difusivo ocorre mesmo na inexistência de fluxo hidráulico. Esse processo depende das concentrações e da tortuosidade do meio poroso. A difusão molecular geralmente é considerada secundária e desprezível, quando comparada a dispersão mecânica, tornando-se importante quando a velocidade da água subterrânea é muito baixa (FREEZE e CHERRY, 1979; ZHENG e WANG, 1999).

A difusão molecular de um soluto em água pura é governada pela primeira lei de Fick, representada pela Eq. 8, sendo que esta define o fluxo unidimensional de massa em estado estacionário (INCROPERA et al., 2008).

$$J_x = -D_0 \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8)$$

Onde: J_x é o fluxo de massa de soluto na direção x por unidade de área, C é a concentração em massa do soluto na solução e D_0 é o coeficiente de difusão ou difusividade molecular em água pura.

2.2 ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

A água encontra-se distribuída de diversas formas e em diversos locais da Terra. Estima-se que 97,5 % da água encontrada no planeta é salgada e, portanto, não adequada ao consumo direto e nem para irrigação de plantações. Dos 2,5 % de água doce, grande parte (69 %) é difícil acesso, pois encontra-se concentrada nas geleiras, 30 % são águas subterrâneas (depositadas nos aquíferos) e apenas 1% encontra-se armazenadas nos rios. Logo, a utilização da água deve ser planejada de modo que não prejudique nenhuma das aplicações que ela possui para a vida na terra a curto, médio e longo prazo (ANA, 2019).

Águas subterrâneas são todas as águas que ocorrem sob a superfície do solo, ocupando os poros ou vazios intergranulares das rochas sedimentares, ou as fraturas, falhas e fissuras das rochas compactas, quando exposta a duas forças (de adesão e de gravidade) desempenham um papel fundamental na conservação da umidade do solo, do fluxo dos rios, lagos e brejos. As águas subterrâneas executam uma fase no ciclo hidrológico, pois constituem uma parte da água precipitada (LEGNER, 2013).

Um aquífero é um reservatório subterrâneo de água, marcado por camadas ou formações geológicas razoavelmente permeáveis, aptos a armazenar e transportar água em porções que possam ser utilizadas como fonte de abastecimento para distintas aplicações (IRITANI e EZAKI, 2008).

As águas subterrâneas apresentam alto padrão de qualidade físico-química e bacteriológica. Apesar de serem naturalmente protegidas, mas não imunes, dos intermediários de contaminação, essas águas dispõem em alguns casos tratamentos físico-químicos. A poluição da água subterrânea pode ser direta ou indireta, ambas podem ter relação com

atividades humanas e/ou por processos naturais. Devido à complexidade técnica de remediação e os custos elevados, em casos de contaminação, os processos de remediação podem ser dispendiosos, demandando longos períodos de tempo (MMA, 2007).

2.3 CONTAMINAÇÃO DO SOLO E DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

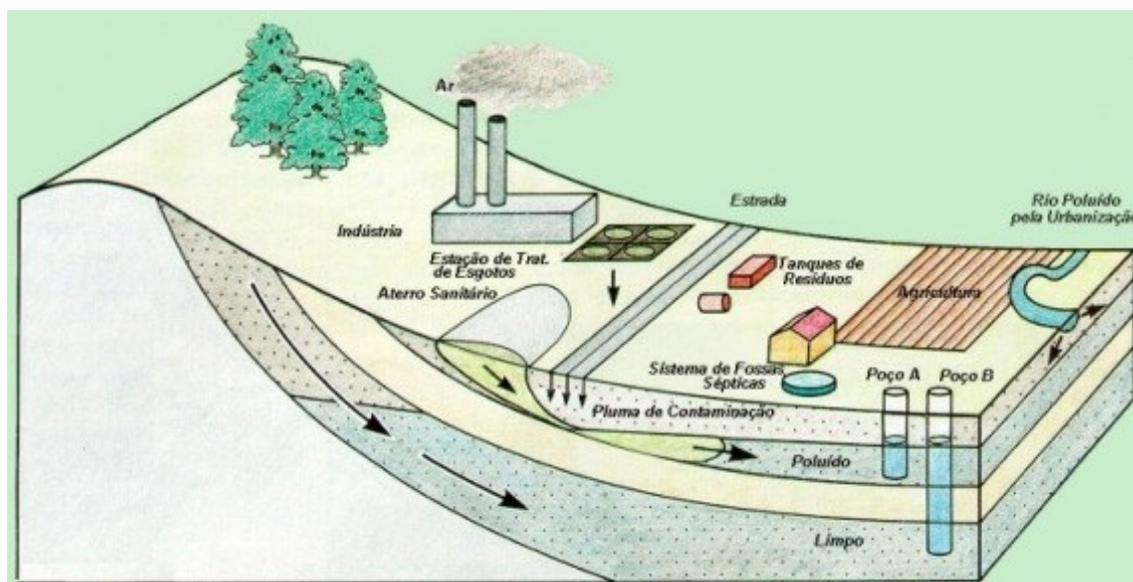
A urbanização é uma realidade no mundo todo, mundialmente este processo tem sido intenso, alterando rapidamente a dinâmica das cidades. Simultaneamente os centros urbanos obtêm indiscutível protagonismo econômico e político, eles também são providos de um conjunto importante de aspectos negativos relacionados à sociedade atual, tais como a degradação ambiental, a exclusão social, a insegurança e os congestionamentos de tráfego (ABIKO e MORAES, 2009).

As alterações causadas pelas atividades humanas ao meio ambiente são as mais diversas, essas modificações podem ser observadas na forma de inundações, potencialização do efeito estufa, esgotamento dos recursos naturais, contaminação do solo e das águas subterrâneas (MARKETING ECOSOL, 2018).

Esses impactos negativos decorrem do aumento da utilização de agrotóxicos, dos grandes volumes de efluentes domésticos gerados, da deposição inadequada e sem controle de grandes quantidades geradas de lixo, da intensa exploração e utilização de combustíveis fósseis, e pôr fim a intensa atividade das indústrias químicas, têxteis, entre outras, que contribuem na geração de efluentes líquidos com elevadas concentrações de componentes tóxicos e gases liberados para a atmosfera, conforme apresentado na Figura 3.

Diante dessas fontes de contaminação, dispõem-se da resolução proposta pelo Conselho Nacional do Meio Ambiente – CONAMA nº 420/2009, que discorre sobre critérios e valores orientadores de qualidade do solo quanto à presença de substâncias químicas e estabelece diretrizes para o gerenciamento ambiental de áreas contaminadas por essas substâncias em decorrência de atividades antrópicas.

Figura 3 – Principais fontes de contaminação do solo e das águas subterrâneas.



Fonte: DRM/RJ (2019).

2.3.1 Contaminação do solo e das águas subterrâneas por derramamento de contaminantes ácidos

Problemas que envolvem a degradação do meio ambiente não surgiram repentinamente. Historicamente, foram acumulando-se desde a revolução industrial até as décadas atuais. Em alguns países desenvolvidos, por exemplo, por não terem políticas controladoras da ação das indústrias químicas ou correlatas e, ainda, por não conhecerem a dimensão dos problemas que as tecnologias obsoletas geram e por ânsia de produção desenfreada, este problema tem se agravado e provavelmente será muito difícil à reconstituição de solos e rios contaminados (BONILLO, 1994).

A ocorrência de contaminações ambientais envolvendo contaminantes ácidos é comum no Brasil e no Mundo. Tais ocorrências podem ser provocadas por diversos fatores, tais como: tombamento de caminhões, naufrágios de navios-cisternas, vazamentos, rejeitos industriais, lixo tóxico, entre outros. A seguir estão descritas algumas ocorrências ambientais.

Na Alemanha, no ano de 2011, um navio-cisterna que transportava mais de 2000 toneladas de ácido sulfúrico naufragou no Rio Reno na altura de Sankt Goar, entre as cidades de Koblenz e Mainz (G1, 2011(a)). Também em 2011, um caminhão que transportava ácido sulfúrico tombou na marginal tietê, o material ficou exposto na pista por mais de 12 horas (G1, 2011(b)).

Em 2004, a estação de tratamento de esgoto da Sanepar, contaminou o Rio Cambuí, em Campo Largo, Região metropolitana de Curitiba, através do vazamento de 3,5 mil litros de ácido clorídrico (HCl). Esse acidente ocorreu devido a abertura do registro do dique que deveria conter o produto, o ácido vazou para o rio por cerca de duas horas. Esse acidente provocou a morte de um grande volume de peixes do rio (AMBIENTE BRASIL, 2004).

Na cidade Nova Era, no interior de Minas Gerais, uma carreta bitrem transportando 23 mil litros de ácido sulfúrico tombou na BR-381 causando o vazamento do material pela galeria pluvial e atingiu o rio (HEMERSON, 2012).

Na Rodovia Marechal Rondon, no trecho de Penápolis (SP), um caminhão que transportava Sulfato de Alumínio (sal de caráter ácido) provocou contaminação do solo. O produto químico ficou espalhado pela pista e no acostamento da rodovia. O material contaminante é aplicado para tratamento de esgoto industrial, esse acidente ocorreu em 2015 (G1, 2015(c)).

Os poluentes ácidos podem penetrar nas camadas mais profundas do solo, comprometendo a qualidade das águas subterrâneas. Quando contamina as águas superficiais promove alteração da fauna e da flora aquática, levando a morte de muitos de seus habitantes. Dentre os problemas de saúde pública que podem causar, os principais são respiratórios e no trato gastrointestinal.

2.3.1.1 Ácido Sulfúrico (H_2SO_4)

O ácido sulfúrico é um ácido mineral diprótico forte, incolor e inodoro, e nas condições normais apresenta-se na forma líquida (P.F. = 10 °C, P.E. = 337 °C, $\rho = 1840 \text{ kg/m}^3$). Ao ser dissolvido em água se ioniza, sendo a reação altamente exotérmica. Devido a sua ação desidratante, este ácido tem papel importante na absorção de água formada em diversas reações químicas, como a esterificação e a sulfonação (CAMPOS, 2011).

As principais aplicações do ácido sulfúrico incluem a fabricação de fertilizantes, processamento de minérios, síntese química, processamento de efluentes líquidos e refino de petróleo. A relevância do ácido sulfúrico é bastante significativa, o consumo per capita deste produto químico, é um dos indicadores para medir o desenvolvimento industrial de um país. Anualmente, o Brasil importa mais de 546 milhões de toneladas desse ácido, sendo este um dos produtos químicos mais fabricados e utilizados no mundo (MDIC, 2019; VALE, 2017).

O ácido sulfúrico é corrosivo e irritante, podendo provocar efeitos locais na pele, trato respiratório e gastrointestinal por contato direto. A inalação de gotículas de ácido sulfúrico causa dificuldade para respirar e irritação do trato respiratório. A ingestão de ácido sulfúrico

causa irritação da boca e garganta, podendo causar erosão do estômago. Em contato com os olhos ou pele, promove queimadura química com irritação e vermelhidão locais, podendo ferir ou cegar, dependendo das concentrações (FREITAS *et al.*, 2012).

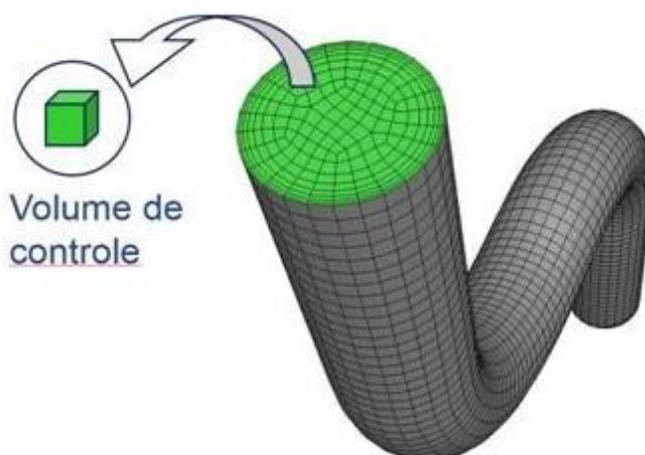
2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

CFD é o termo dado ao grupo de técnicas matemáticas, numéricas e computacionais, usadas para obter, visualizar e interpretar soluções computacionais para as equações de conservação de grandezas físicas de estudo de um escoamento. Então se pode definir *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*) como o conjunto das técnicas de simulação computacional usada para prever os fenômenos físicos e físico-químicos que ocorrem em escoamentos que podem ser relacionados com a ação interação de fatores como dissipação, difusão, convecção, ondas de choque, superfícies escorregadias, condições de contorno e turbulência.

Historicamente, a Fluidodinâmica Computacional teve início na década de 70 (TU; YEOH; LIU, 2008). Esta ferramenta computacional trata da simulação numérica de escoamentos de fluidos, transferência de calor e matéria, para fenômenos relacionados como reações químicas, combustão, aerocústica, secagem, entre outros. As equações que regem os escoamentos de fluidos tiveram origem na mecânica dos fluidos e podem ser resolvidas por meio dos diversos métodos numéricos tais como volumes finitos, diferenças finitas, elementos finitos, dentre outros (ESSS, 2016).

Para se aplicar a fluidodinâmica computacional é necessário dividir a geometria de interesse (criada a partir de coordenadas no espaço, próximas da geometria real do objeto de estudo) em um número de células computacionais denominadas de malha, Figura 4, ou elementos de volume de controle. Esta tarefa, conhecida por discretização, é geralmente realizada empregando programas computacionais que utilizam o CAD (Computer Aided Design) (FARIAS, 2006). Uma maneira de ter acesso a esse tipo de programa é usando dos pacotes comerciais que incluem sofisticadas interfaces que permitem ao usuário a implementação do problema, bem como examinar os resultados. Estes pacotes são geralmente divididos em três elementos principais, sendo eles: Pré-processador, processador e pós-processador.

Figura 4 - Domínio discretizado.



Fonte: ESSS (2016).

No processador, é preciso considerar que os fenômenos associados ao escoamento do fluido real são, geralmente, governados por equações complexas e não-lineares, resolvidos por meio de soluções iterativas. Estas soluções envolvem todos os valores discretos das propriedades de fluxo como velocidade, pressão, temperatura e outros parâmetros de interesse.

No pós-processador, é possível visualizar os resultados destas equações através de gráficos X-Y (para duas dimensões), campos de pressão, vetores velocidade, campos de temperatura, frações volumétricas e animações, entre outros, que contribui para um melhor entendimento do problema em estudo.

Dentre os pacotes comerciais disponibilizados nos limitaremos a listar alguns deles com seus respectivos métodos numéricos de discretização: (a) Diferenças finitas: FLOW-3D; (b) Elementos finitos: FIDAP, ANSYS, FEMFLOW, (c) Volumes finitos: FLUENT, Ansys CFX, PHOENICS.

2.5 APLICAÇÕES DOS MECANISMOS DE TRANSPORTE DE POLUENTES NO SOLO

O estudo numérico do comportamento de uma pluma de contaminantes metálicos (cobre e cádmio) decorrente de um vazamento em lagoa de tratamento de esgoto foi realizado por Santos (2015). O autor empregou o software ANSYS CFX 12.1, que utiliza os volumes finitos para resolver as equações de conservação de massa e momento linear. Foi possível observar numericamente que a dispersão da pluma de contaminantes de cobre e cádmio e que, a longo

prazo, ela tenderá a atingir o lençol freático. Moreira e Braga (2009) mostraram que a pluma de contaminantes de derivados do petróleo oriunda de indústrias químicas do município de Araras-SP, cujo solo caracteriza-se por ser silte-argiloso, se deslocou levando ao comprometimento da qualidade dos aquíferos mais próximo, ou seja, não se limitou apenas à região de ocorrência da contaminação (poço de injeção). Também observaram que em um período de quatro anos, alterações químicas foram detectadas em poços de abastecimentos próximos a área de infiltração.

Oliveira (2009) estudou numericamente o comportamento da pluma de contaminantes proveniente de áreas onde há disposição de resíduos sólidos, devido à grande dificuldade de se evitar contaminação do subsolo e das águas subterrâneas, através da aplicação do software PMWIN/MODFLOW. O autor observou, que o modelo matemático aplicado permitiu observar o comportamento das águas subterrâneas e verificar a propagação da pluma de contaminantes, permitindo dessa forma que técnicas de remediação e ações de prevenção da contaminação possam ser adotadas de forma mais eficiente.

Nos estudos de Favero *et al.* (2007) foi desenvolvido um código computacional capaz de prever o transporte de poluentes em meios porosos, baseado nas equações de conservação de massa, transferência de matéria e momento linear. Estudos experimentais e numéricos foram realizados para validar o modelo e o código computacional, utilizando como poluente a gasolina. Eles concluíram que houve uma boa concordância entre os resultados obtidos, já que o código computacional foi capaz de prever a extensão da área afetada, como também os níveis de concentração do poluente.

Trabalhando com a solução contaminante composta por Cloreto de Sódio e água destilada, Arêas (2006) demonstrou que em um solo composto de um material granular, ou seja, com um elevado número de vazios, o transporte do contaminante ocorre em um curto período de tempo. Do ponto de vista geoambiental, a capacidade de retenção de contaminantes de um material granuloso é bem menor, se comparada a um solo argiloso, pois a areia apresenta alta permeabilidade (maior fluxo por advecção) e baixo teor de finos e matéria orgânica, pois antes de se iniciarem os ensaios, procedeu-se a sua lavagem.

Paraíba (2003) estudou um modelo de dispersão–advecção que simula a lixiviação de pesticidas em solo sob efeito da temperatura média diária do perfil do solo. Nas simulações numéricas serão utilizados o método dos elementos finitos apropriados para problemas de dispersão–advecção nos quais o transporte advectivo predominou sobre o transporte dispersivo. O coeficiente de dispersão hidrodinâmico do modelo dependia da temperatura do solo, bem como o coeficiente de partição água–ar determinado pela equação de Clausius–Clapeyron.

Estas relações de dependência entre os parâmetros do modelo e a temperatura do solo auxiliaram na compreensão da dispersão de pesticidas no solo sob diferentes cenários de temperaturas médias. O autor concluiu que as simulações numéricas apresentadas indicaram a importância da temperatura do solo no processo de lixiviação de pesticidas, principalmente por esta afetar significativamente a degradação do pesticida no solo e a sorção destes compostos na matéria sólida da matriz do solo.

3 METODOLOGIA

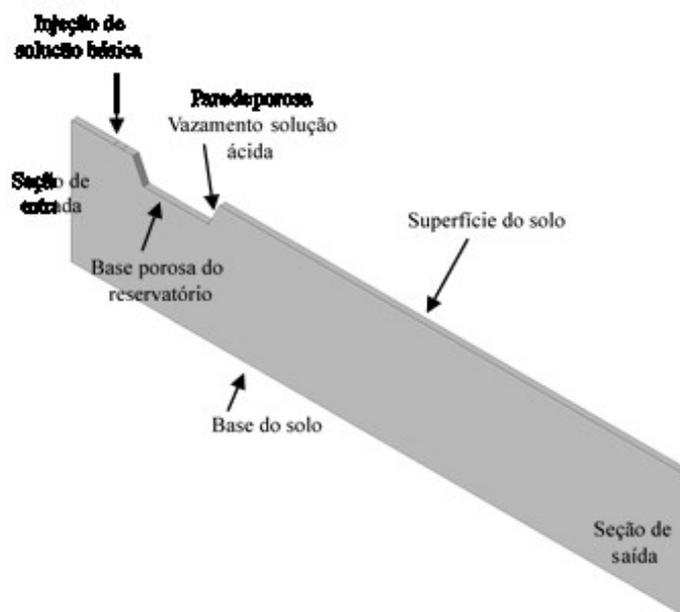
Este trabalho foi desenvolvido em parceria com o Laboratório Computacional em Térmica e Fluidos (LCTF) e Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem (LPFI), das Unidades Acadêmicas de Engenharia Mecânica e de Engenharia Química, respectivamente, da UFCG. Todas as simulações foram realizadas utilizando o pacote comercial ANSYS CFX® 15.0.

3.1 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O domínio computacional estudado (ver Figura 5) consistiu em uma lagoa de armazenamento de ácido sulfúrico, com dimensões 200 m x 20 m, sendo está baseada no trabalho de Santos (2015). Considerou-se que em um dos taludes dessa lagoa existia uma rachadura, sendo esta a causa do vazamento de ácido sulfúrico. Objetivando solucionar o problema ambiental gerado pelo vazamento do ácido anteriormente referido injetou-se hidróxido de sódio no solo.

O contaminante estudado foi o ácido sulfúrico, por estar associado a problemas ambientais (perda de biodiversidade, contaminação de solos e de aquíferos) e de saúde pública (podem provocar lesões ulcerativas e danos severos ao aparelho digestivo) (FREITAS et al., 2012).

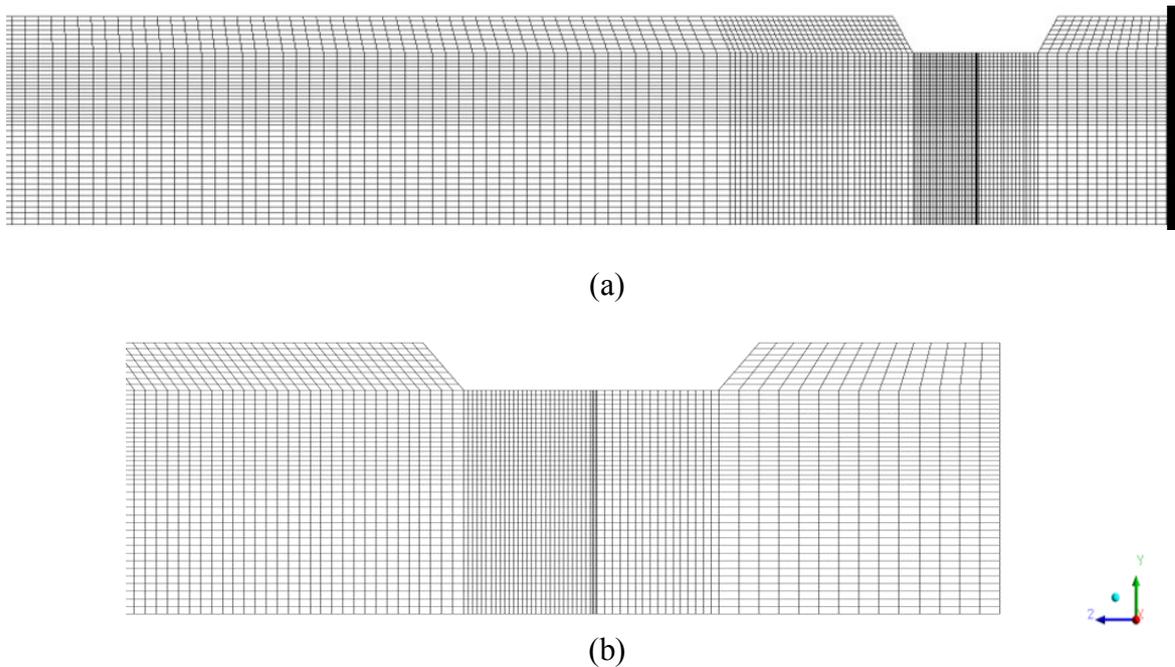
Figura 5 – Geometria final do domínio computacional estudado.



3.1.1 Malha Computacional

Para geração da malha da região ou domínio de estudo (Figura 6), foi utilizado o ICEM-CFD 15.0®. Para isso, foi necessário representar a geometria por meio de pontos, curvas, superfícies e corpo, em um espaço bidimensional, através de duas etapas principais: a primeira, confecção da geometria (técnica de multi-blocos) e a segunda, geração da malha propriamente dita. Após sua obtenção, foram feitos alguns refinamentos visando a não-dependência da mesma com os resultados numéricos. A malha final resultante deste procedimento, Figura 6a, é formada por 25.044 elementos hexaédricos e 32.300 nós. Na Figura 6b, observa-se o detalhe da malha refinada.

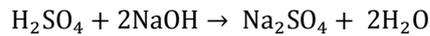
Figura 6 – Malha numérica de simulação; (a) visão geral e (b) detalhe da região do reservatório de ácido.



Fonte: Construído pela autora com os dados da pesquisa.

3.2 MODELAGEM MATEMÁTICA

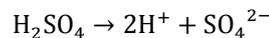
O ácido sulfúrico e o hidróxido de sódio sofrem uma reação exotérmica para formar uma solução de sulfato de sódio (um tipo de sal) e água de acordo com a reação mostrada a seguir:



Assume-se que a solução alcalina é composta por água e íons de hidróxido de sódio, e que estes se dissociam completamente de acordo com a seguinte reação:



A solução ácida é composta de ácido sulfúrico e água, sendo que as moléculas do ácido se dissociam completamente em íons de acordo com a seguinte reação:



Os cálculos utilizados para modelar as reações ácido-alcalina e para medir o pH demandaram de uma relação estequiométrica baseada na massa, que expressa a razão de massa entre a solução alcalina e a solução ácida, necessária para a reação completa de todos íons dissociados dessas moléculas dentro do solo poroso (Manual Ansys CFX[®]).

Usando X^{2-} para denotar SO_4^{2-} e Y^+ para denotar Na^+ , a massa de solução alcalina necessária deverá conter 2 kmol de Y^+ , e a massa de solução ácida será 1 kmol de X^{2-} . A relação i , pode ser calculada como a razão das duas massas anteriormente citadas, esta é calculada de acordo com a Equação 9:

$$i = \frac{\frac{2 \text{ kmol } Y^+}{\beta \text{ kmol } Y^+ / \text{kg}}}{\frac{1 \text{ kmol } X^{2-}}{\alpha \text{ kmol } X^{2-} / \text{kg}}} = \frac{2\alpha}{\beta} \quad (9)$$

Na qual: α é a razão entre a fração mássica de ácido sulfúrico e massa molar da solução ácida, cuja unidade é kmol de H_2SO_4 / kg de solução; β é a razão entre a fração mássica de hidróxido de sódio e a massa molar da solução alcalina, cuja unidade é kmol de NaOH / kg de solução.

Para estudar o comportamento dinâmico do pH da reação de neutralização em solo saturado, a distribuição do pH e determinar a extensão da neutralização da reação, adotou-se o modelo de escoamento monofásico e multicomponente. Este modelo é baseado nas equações de conservação de massa e momento linear, os quais foram feitas as seguintes considerações:

- i) Escoamento operando em regime turbulento;
- ii) Fluido incompressível (água) com propriedades físico-químicas constante;
- iii) O meio poroso (solo) foi considerado isotrópico (Porosidade e permeabilidade constantes).

Com base nas considerações feitas, as equações de conservação podem ser escritas como sendo:

- Equação da Conservação de Massa (ver Equação 10)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho\gamma) + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{K} \cdot \vec{V}) = 0 \quad (10)$$

- Equação do Momento Linear (ver Equação 11)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho\vec{V}) + \nabla \cdot \rho \cdot (\mathbf{K} \cdot \vec{V}) \otimes \vec{V} - \nabla \cdot (\mu_e \cdot \mathbf{K} (\nabla\vec{V} + (\nabla\vec{V})^T - \frac{2}{3}\delta\nabla \cdot \vec{V})) = \Phi S_M - \Phi \nabla P \quad (11)$$

Onde: ϕ é a porosidade, \vec{V} é o vetor velocidade, ρ é a densidade, \mathbf{K} é o tensor permeabilidade, μ_e é a viscosidade efetiva, S_M é uma fonte de momento (representa uma resistência ao escoamento no meio poroso) e P é a pressão.

- Equação de transporte para a fração de massa da solução ácida (ver Equação 12)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_{f_{acid}}) + \nabla \cdot (\rho U m_{f_{acid}}) - \nabla \cdot (\rho D_A \nabla m_{f_{acid}}) = -4\rho \frac{\varepsilon}{K} \min\left(m_{f_{acid}} + \frac{m_{f_{alkali}}}{i}\right) \quad (12)$$

A Eq. 12 foi utilizada para calcular o transporte da fração mássica da solução básica. Onde: t é o tempo, U é a velocidade, ρ é a densidade local da mistura de composição variável, $m_{f_{acid}}$ é a fração de massa da solução ácida na mistura, D_A é a difusividade cinemática da solução ácida através da mistura, e i é a relação estequiométrica de solução alcalina para

solução ácida com base na fração de massa. O lado direito da equação representa o termo da fonte de massa que é aplicado à equação de transporte para a solução ácida. O lado esquerdo é composto pelos termos transiente, advecção e difusão.

O pH (ou acidez) da mistura é uma função da concentração, baseada em volume de íons. Desta forma pode ser calculado usando as duas equações a seguir, que são baseadas nas condições de conservação de carga (Eq. 13) e equilíbrio (Eq. 14), respectivamente:

$$[\text{H}^+] + [\text{Y}^+] = 2[\text{X}^{2-}] + [\text{OH}^-] \quad (13)$$

$$[\text{H}^+] [\text{OH}^-] = K_w \quad (14)$$

Combinando as Equações 13 e 14, obteve-se a seguinte Eq. 15 (quadrática):

$$[\text{H}^+]([\text{H}^+] + [\text{Y}^+] - 2[\text{X}^{2-}]) = K_w \quad (15)$$

Rearranjando-se a Eq. 15, obteve-se a Eq. 16:

$$[\text{H}^+]^2 + ([\text{H}^+] + [\text{Y}^+] - 2[\text{X}^{2-}]) - K_w = 0 \quad (16)$$

A Eq. 15 (quadrática) pode ser resolvida para determinar $[\text{H}^+]$ usando a Eq. 17, citada abaixo:

$$[\text{H}^+] = \frac{-b + \sqrt{\max[(b^2 - 4ac), 0]}}{2a} \quad (17)$$

Onde: $a=1$, $b=[\text{Y}^+] - 2[\text{X}^{2-}]$ e $c= -K_w$ (consiste na constante de ionização da água).

As concentrações volumétricas $[\text{X}^{2-}]$ e $[\text{Y}^+]$ foram necessárias para calcular b , e foram determinadas utilizando as Equações 18 e 19, abaixo descritas:

$$[\text{X}^{2-}] = \alpha\rho \left(m_{f_{\text{acid}}} + \frac{m_{f_{\text{prod}}}}{1 + i} \right) \quad (18)$$

$$[Y^+] = \beta \rho \left(mf_{\text{alkali}} + \frac{mf_{\text{prod}}}{1+i} \right) \quad (19)$$

Onde, $[X^{2-}]$ é a concentração de X^{2-} em kmol/m^3 ; $[Y^+]$ é a concentração de Y^+ em kmol/m^3 ; α é concentração do H_2SO_4 em kmol/kg de solução (que é igual a concentração de X^{2-} em kmol/kg de solução); β é a concentração de NaOH em kmol/kg de solução (que é igual a concentração de Y^+ em kmol/kg de solução); ρ é densidade local da mistura de composição variável; i é a relação estequiométrica em massa da solução alcalina para a solução ácida.

Substituindo-se a relação, $\beta = 2\alpha i$, na Eq. 19, obteve-se a Eq. 20 abaixo citada:

$$[Y^+] = 2\alpha \rho \left(\frac{mf_{\text{alkali}}}{i} + \frac{mf_{\text{prod}}}{1+i} \right) \quad (20)$$

Após determina-se a concentração de íons H^+ , calculou-se o pH utilizando-se a seguinte equação (ver Eq. 21):

$$\text{pH} = -\log_{10}[\text{H}^+] \quad (21)$$

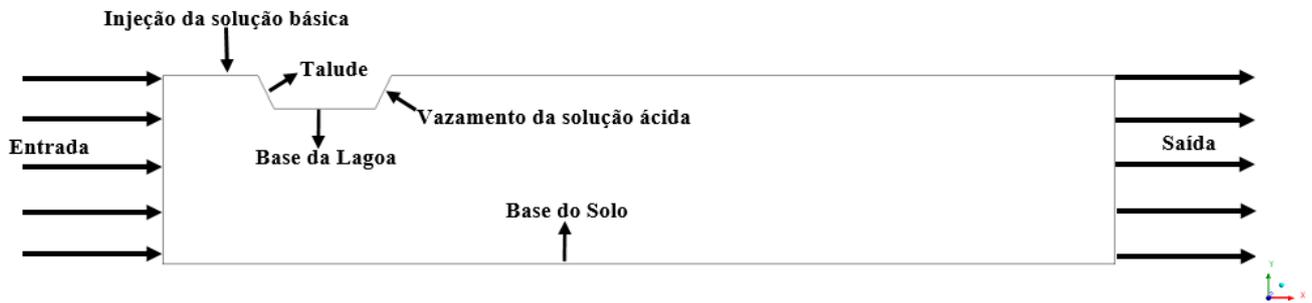
Para estabelecer um limite de pH para fins de cálculo, a seguinte relação (ver Eq.22) foi utilizada.

$$\text{pH} = -\log_{10} (\max[[\text{H}^+], 10^{-15}]) \quad (22)$$

3.2.1 Condições Iniciais e de Contorno

As condições de contorno, apresentadas na Figura 7, foram aplicadas sobre as fronteiras do domínio meio poroso.

Figura 7 – Condições de contorno.



Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

O domínio estudado (meio poroso) foi inicialmente saturado com água, ou seja, fração mássica de água (f_w) é igual a 1.

Adotou-se as seguintes condições de contorno:

Na seção de entrada:

$$w = v_{H_2O} \quad (\text{Quadro 2})$$

$$f_w = 1; f_{H_2SO_4} = 0; f_{NaOH} = 0$$

Na seção de saída:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{\partial u}{\partial y_i} = 0 \quad i = x, y$$

Velocidade de vazamento:

$$v = v_{H_2SO_4} \quad (\text{Quadro 2})$$

Velocidade de injeção da solução básica:

$$v = v_{NaOH} \quad (\text{Quadro 2})$$

$$f_w = 0; f_{H_2SO_4} = 0; f_{NaOH} = 1$$

Na base da lagoa e taludes;

Condição de não-deslizamento

Superfície e base do solo (meio poroso)

$$v = w = 0$$

Faces frontal e traseira*

Condição de simetria

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

* Onde u , v e w correspondem, respectivamente, aos componentes de velocidade nas direções x , y e z .

As propriedades físico-químicas dos componentes da reação (água, ácido sulfúrico, hidróxido de sódio e sulfato de sódio) estão dispostas nas Tabelas 1, 2, 3 e 4.

Tabela 1 – Propriedades físico-químicas da Água.

Massa Molar, (kg/kmol)	18,02
Densidade, ρ (kg/m ³)	997,0
Temperatura, T (K)	298,15
Pressão, P (atm)	1
Calor Específico, c (j/kg.k)	4181,7

Tabela 2 – Propriedades físico-químicas do Ácido Sulfúrico.

Massa Molar, (kg/kmol)	19,517
Densidade, ρ (kg/m ³)	1835,6
Calor Específico, c (j/kg.k)	1340

Tabela 3 – Propriedades físico-químicas do Hidróxido de Sódio.

Massa Molar, (kg/kmol)	39,99
Densidade, ρ (kg/m ³)	1029
Calor Específico, c (j/kg.k)	3471

Tabela 4 – Propriedades físico-químicas do Sulfato de Sódio.

Massa Molar, (kg/kmol)	142,036
Densidade, ρ (kg/m ³)	2660
Calor Específico, c (j/kg.k)	1338

Fonte: Tabelas 1,2,3 e 4 construídas com os dados da pesquisa.

Na Quadro 2 são apresentados os casos avaliados, nos quais foram alterados os valores das velocidades de escoamento dos componentes da reação (ácido sulfúrico, água e hidróxido de sódio).

Quadro 2 – Casos Estudados.

Casos	$v_{H_2SO_4}$ (m/s)	v_{NaOH} (m/s)	v_{H_2O} (m/s)
1	0,001	0,001	0,25
2	0,001	0,005	0,25
3	0,001	0,01	0,25
4	0,001	0,001	0,75
5	0,001	0,001	0,001
6	0,01	0,001	0,75
7	0,01	0,05	0,75

Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

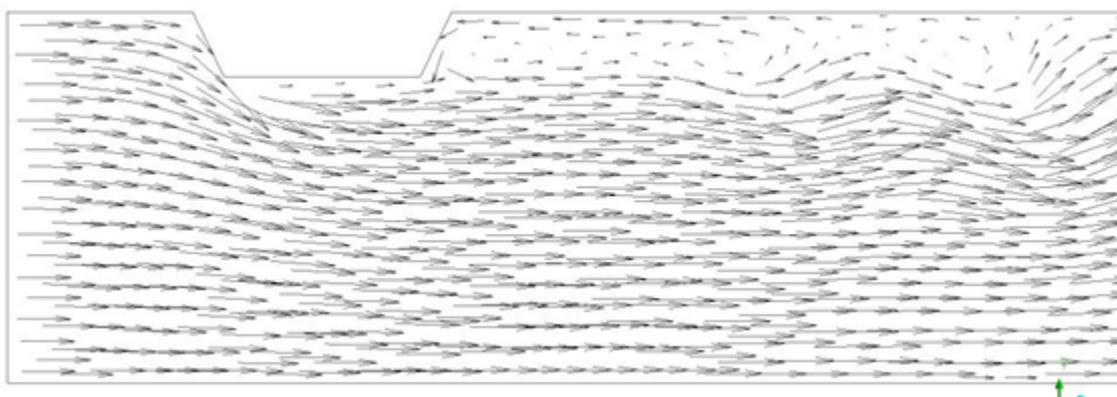
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 ANÁLISE QUALITATIVA

Inicialmente, será mostrado uma análise qualitativa dos resultados obtidos da simulação numérica, para todos os casos estudados.

Na Figura 8 está representado o campo de vetor velocidade da água no solo, quando a mesma se encontra com velocidade de 0,001 m/s (caso 5). Esse resultado tem o intuito de verificar a direção da água no solo. A partir deste resultado, verifica-se como se comportarão as direções tanto do ácido quanto da base e, conseqüentemente, do sal formado na reação de neutralização, uma vez que a água tende a arrastar os outros componentes.

Figura 8 – Campo vetorial de velocidade de água. (Caso 5)

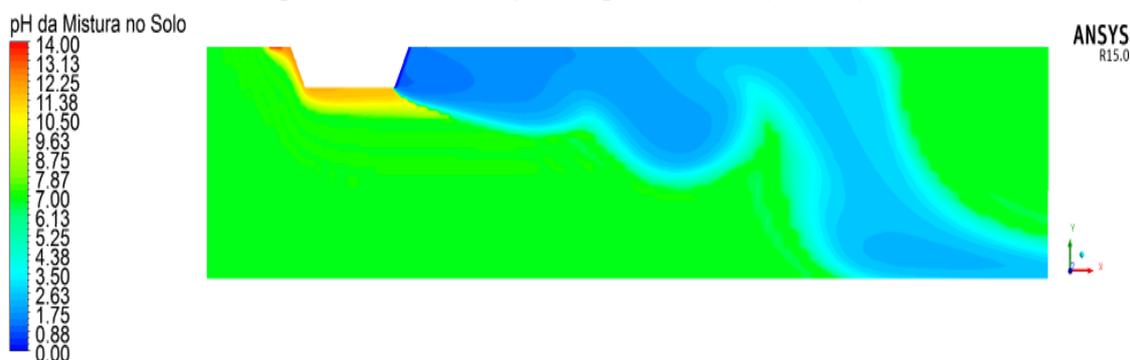


Fonte: Construído pela própria autora.

Vale salientar que este comportamento foi observado também para os demais casos estudados.

Nas Figuras 9 e 10 estão representados, sobre o plano longitudinal XY, a distribuição do pH e a fração mássica do sulfato de sódio, respectivamente, após reação de neutralização. É possível observar na Figura 8 que o solo se mantém com características básicas, ou seja, com valores de pH acima de 8 e que se reduz nas proximidades a base do reservatório, para valores na faixa de 5,25 - 3,50. Nas outras regiões, nas quais só ocorre a presença de água (região verde) o pH da mistura no solo permanece próximo a neutralidade.

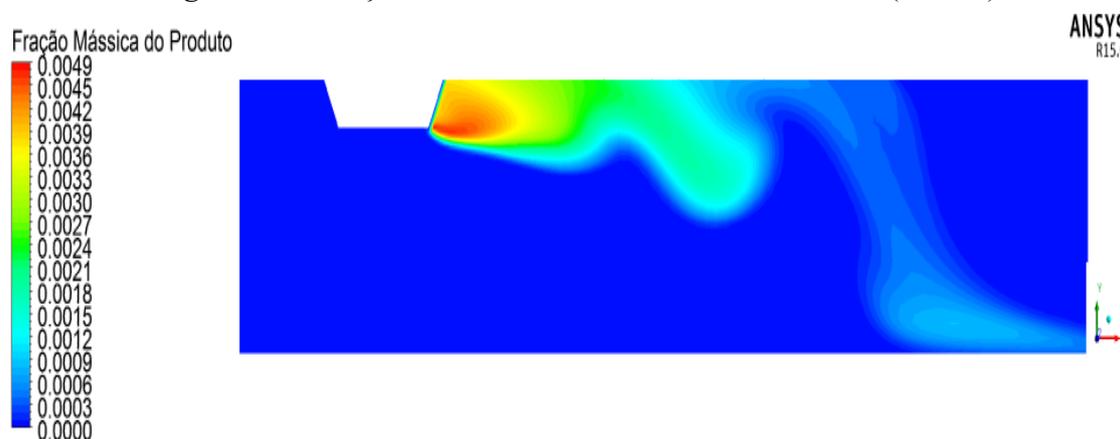
Figura 9 – Distribuição de pH no solo. (Caso 1)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

A partir da observação da Figura 10, nota-se que a fração mássica do produto formado (sulfato de sódio) é maior, próximo ao ponto de vazamento da solução ácida (talude com superfície porosa), essa mesma fração diminui ao longo do solo. Pois a velocidade da solução básica não é suficientemente grande para fazer com que esse componente seja transportando para pontos mais distantes do solo, para que possa continuar a reagir com a solução ácida, formando o produto.

Figura 10 – Fração mássica do sulfato de sódio no solo. (Caso 1)

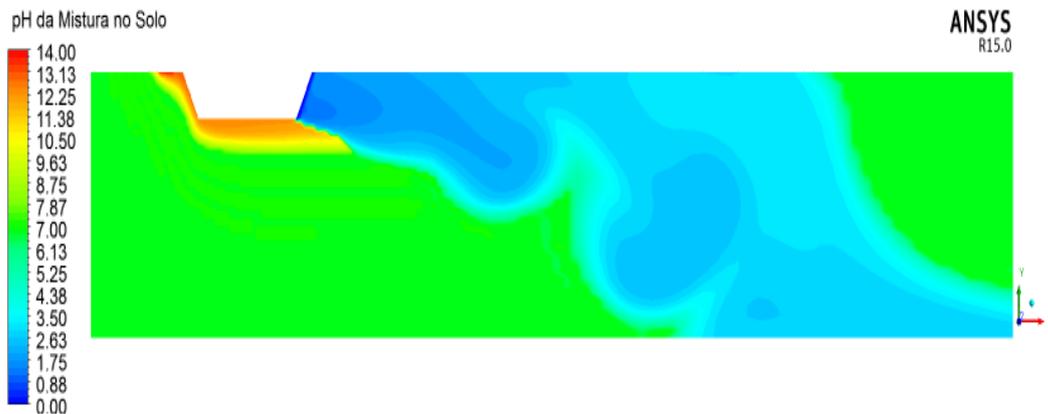


Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Na Figura 11 está representada a distribuição de pH no solo, considerando os dados do Caso 2 (ver Quadro 2). É possível visualizar que assim como no Caso 1, o pH se mantém próximo ao valor 7 até o ponto de vazamento do ácido, que ao entrar em contato com o hidróxido de sódio sofre a reação de neutralização proporcionando a formação do sulfato de sódio e aumento do pH chegando a valores na ordem de 6,2. Observa-se ainda que uma maior

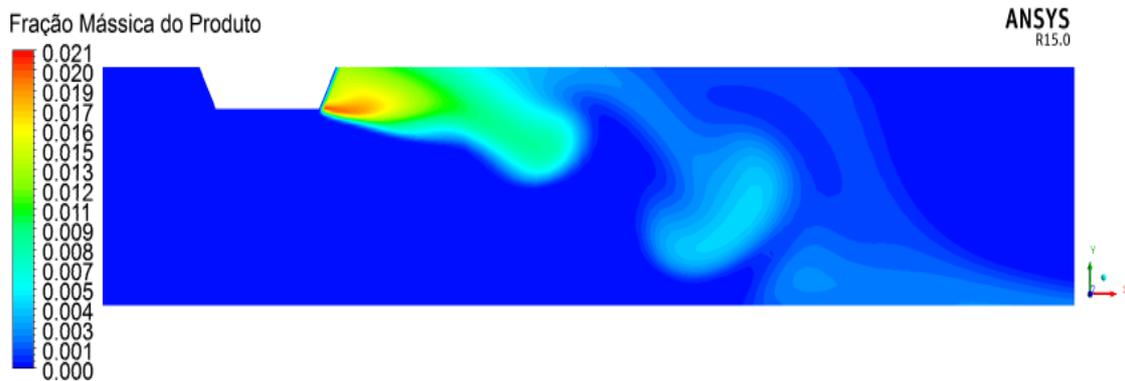
extensão do solo foi contaminada com o ácido e uma porção menor permaneceu neutro. Isso se deve ao aumento na velocidade da solução básica de $0,001 \text{ m.s}^{-1}$ para $0,005 \text{ m.s}^{-1}$. Esse aumento fez com que a base se desloque por uma distância maior e continuando a reagir com o ácido, diminuindo dessa forma a porção do solo com pH próximo da neutralidade. Esse aumento na velocidade, promoveu também um aumento na fração mássica do produto, ou seja, uma maior quantidade de sulfato de sódio foi gerada como produto da reação entre os dois componentes. Essa afirmação pode ser comprovada observando a Figura 12, que ilustra a formação de sal pela reação de neutralização.

Figura 11 – Distribuição de pH no solo. (Caso 2)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Figura 12 – Fração mássica do sulfato de sódio no solo. (Caso 2)

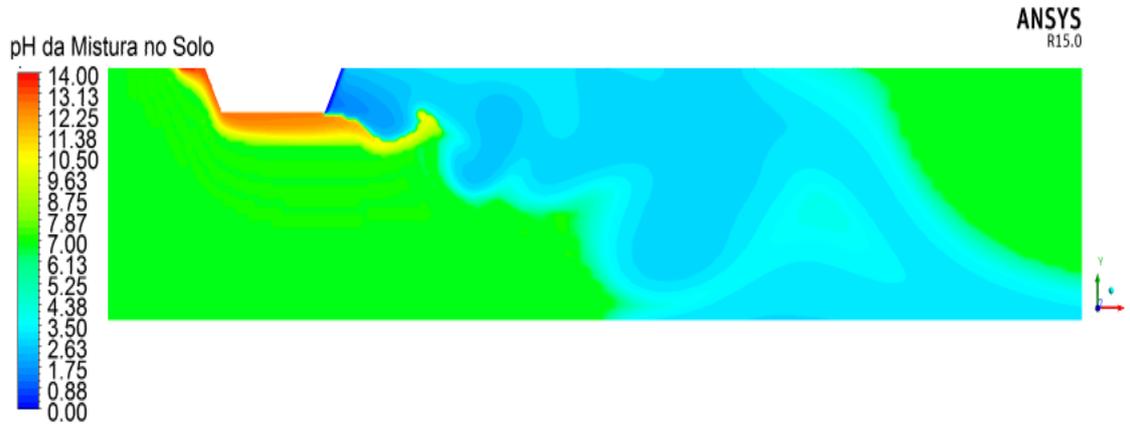


Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Na Figura 13 está ilustrado o efeito do aumento da vazão da solução básica (hidróxido de sódio) adicionada ao solo, referente ao Caso 3 (ver Quadro 2). É possível observar que a solução básica percorreu uma maior extensão do solo, devido ao aumento em sua velocidade

que variou de $0,005 \text{ m.s}^{-1}$ a $0,01 \text{ m.s}^{-1}$, esse fator influencia na extensão do solo que apresenta pH ácido, reduzindo a porção de solo neutro.

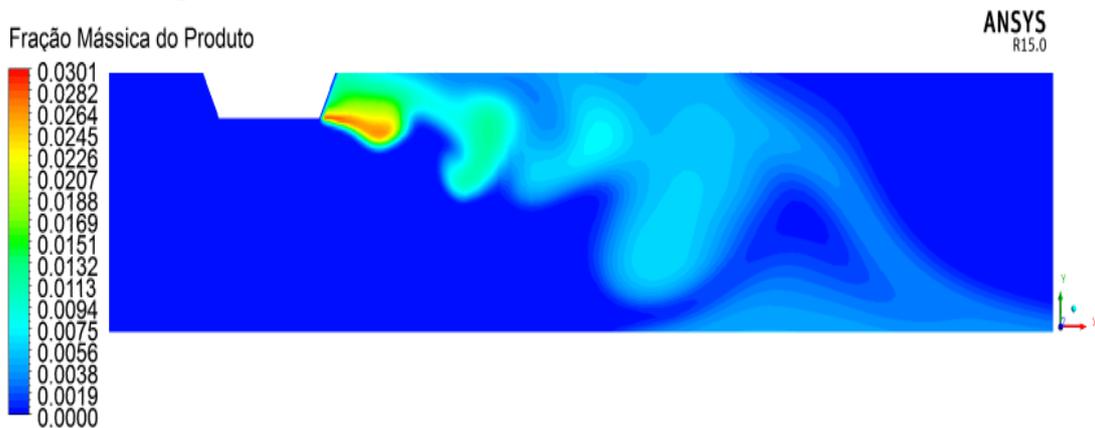
Figura 13 – Distribuição de pH no solo. (Caso 3)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Assim como observado no Caso 2, o aumento de velocidade da base promoveu o aumento da fração mássica do produto, ou seja, aumentou a quantidade em massa de sulfato de sódio produzido durante a reação (ver Figura 14).

Figura 14 – Fração mássica do sulfato de sódio no solo. (Caso 3)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Nas Figuras 15 e 16 é possível visualizar a distribuição do pH no solo e do sulfato de sódio, respectivamente, considerando os dados do Caso 4. O acréscimo na velocidade da água aliado a redução da velocidade da solução básica promove o aumento da porção do solo acidificado, este fato é explicado pelo arraste dos componentes por uma maior extensão do solo.

Além disso, a combinação desses fatores promove redução da fração mássica do produto sintetizado.

Figura 15 – Distribuição de pH no solo. (Caso 4)

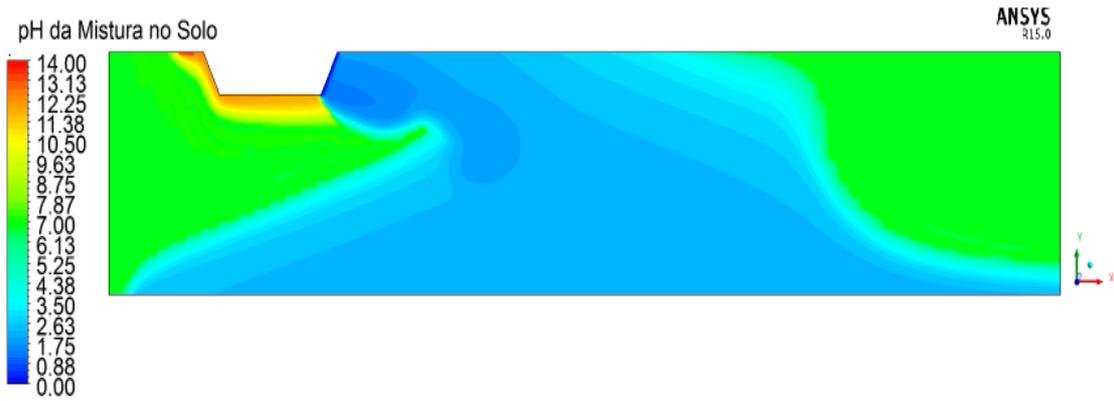
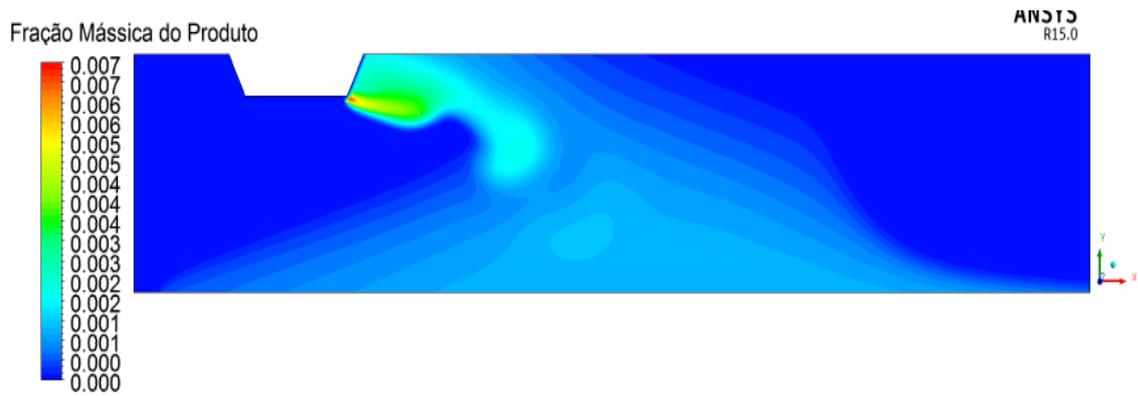


Figura 16 – Fração mássica do sulfato de sódio no solo. (Caso 4)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

A Figura 17 apresenta a distribuição do pH no solo, considerando os dados do Caso 5 (ver Quadro 2). Esses dados mostram que a diminuição de velocidade da água aumenta a porção do solo com pH ácido, e reduz a fração do solo com pH neutro. A diminuição de velocidade da água leva a formação de uma menor quantidade de produto, ou seja, um baixo valor de fração mássica (ver Figura 18).

Figura 17 – Distribuição de pH no solo. (Caso 5)

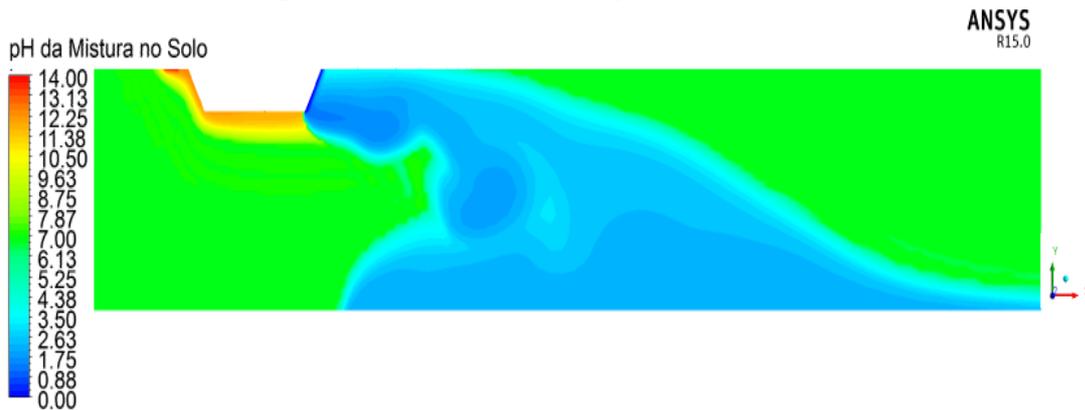
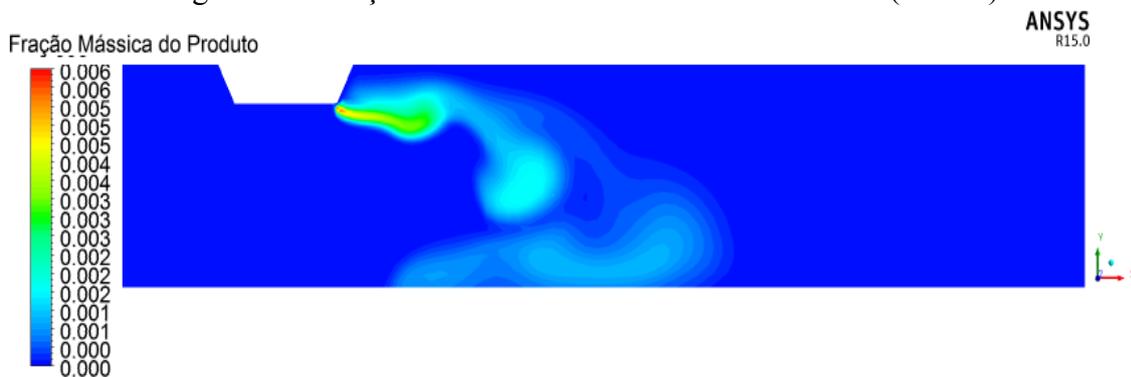


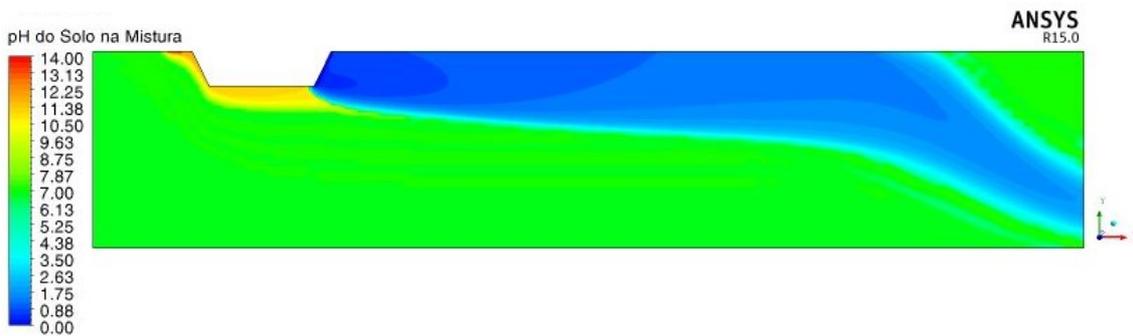
Figura 18 – Fração mássica do sulfato de sódio no solo. (Caso 5)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

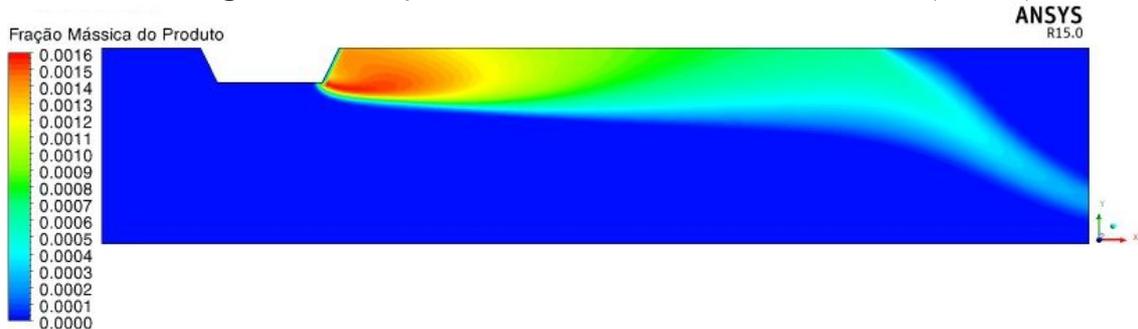
Na Figura 19 é possível observar que um aumento na velocidade de escoamento da solução ácida, promove uma redução na porção do solo acidificada, aumentando dessa forma a parcela do solo que permanece com o pH neutro. Esse acréscimo de velocidade propiciou o transporte do produto sintetizado para regiões mais distantes do solo, sem, no entanto, representar um aumento significativo na quantidade de produto produzido (ver Figura 20). O caso 6 (ver Quadro 2) representa a combinação de velocidades dos reagentes, no qual a menor quantidade de produto foi produzida, sendo a fração mássica igual a 0,016.

Figura 19 – Distribuição de pH no solo. (Caso 6)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Figura 20 – Fração mássica do sulfato de sódio no solo. (Caso 6)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

A Figura 21 demonstra como se comportou a distribuição de pH no solo no Caso 7. A combinação de velocidades do ácido sulfúrico, hidróxido de sódio e água, sendo os valores, respectivamente, $0,01 \text{ m.s}^{-1}$, $0,05 \text{ m.s}^{-1}$ e $0,75 \text{ m.s}^{-1}$, geraram a maior quantidade de sulfato de sódio dentre todos os casos estudados (ver Figura 22). Sendo a fração mássica do produto igual a 0,0746.

Figura 21 – Distribuição de pH no solo. (Caso 7)

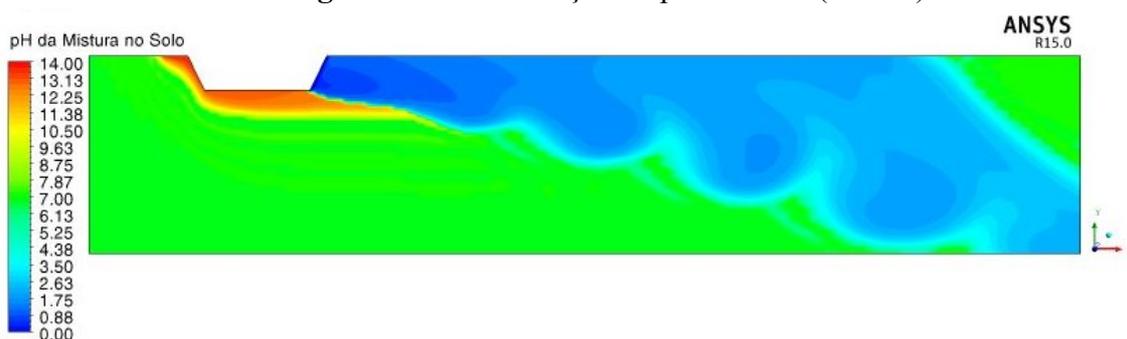
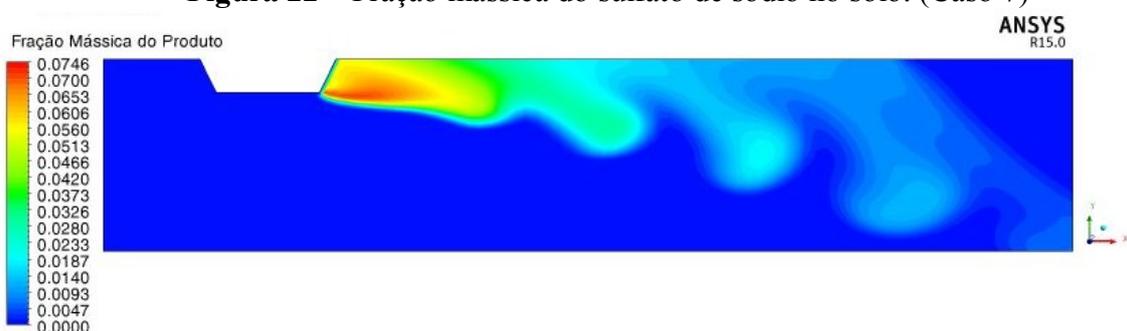


Figura 22 – Fração mássica do sulfato de sódio no solo. (Caso 7)



Fonte: Construído com os dados da pesquisa

4.2 ANÁLISE QUANTITATIVA

Na análise quantitativa, são apresentados os gráficos dos perfis das frações mássicas do ácido, da base e do sal formado em função da altura do reservatório (Figuras 23 a 25) em diferentes posições (Figura 23), dos casos 1 e 4, em que as velocidades do ácido e da base são iguais a 0,001 m/s e a velocidade da água são, respectivamente, 0,25 e 0,75 m/s.

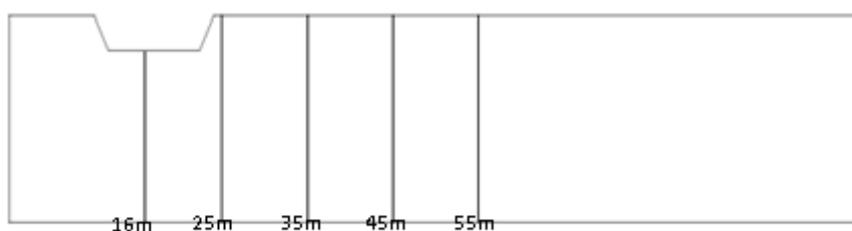
Na Figura 24 está representado o comportamento dos perfis de fração mássica do ácido em função da posição vertical (Y) do domínio de estudo em diferentes posições (16 m, 25 m, 35 m, 45 m e 55 m), para os casos 1 (Figura 24a) e 4 (Figura 24b). É possível observar que, de uma maneira geral, as regiões com maiores frações mássicas se encontram próximas ao vazamento de ácido, na posição de 25 m. Este resultado é esperado, pois uma pequena porção da base não entrou em contato com o ácido. Percebe-se, ainda, que as frações mássicas do ácido tendem a diminuir à medida que se afasta do ponto onde ocorre seu vazamento, com tendência de se concentrar próximo a superfície do solo, sendo arrastado pela corrente da água para longe

do ponto de vazamento. Resultado semelhante pode ser observado para a base, já que ao atingir a posição de 16 m, a mesma ainda não entrou em contato com o ácido, tendo a sua maior fração mássica aferida nessa posição, para os dois casos estudados.

Quando a velocidade da água aumenta, caso 4 (Figuras 24b e 25b), os contaminantes tendem a serem arrastados para mais distantes do ponto de vazamento de ácido e de injeção de base, possibilitando, assim, que a reação de neutralização ocorra mais rapidamente, diminuindo as suas frações mássicas ao longo da extensão do solo.

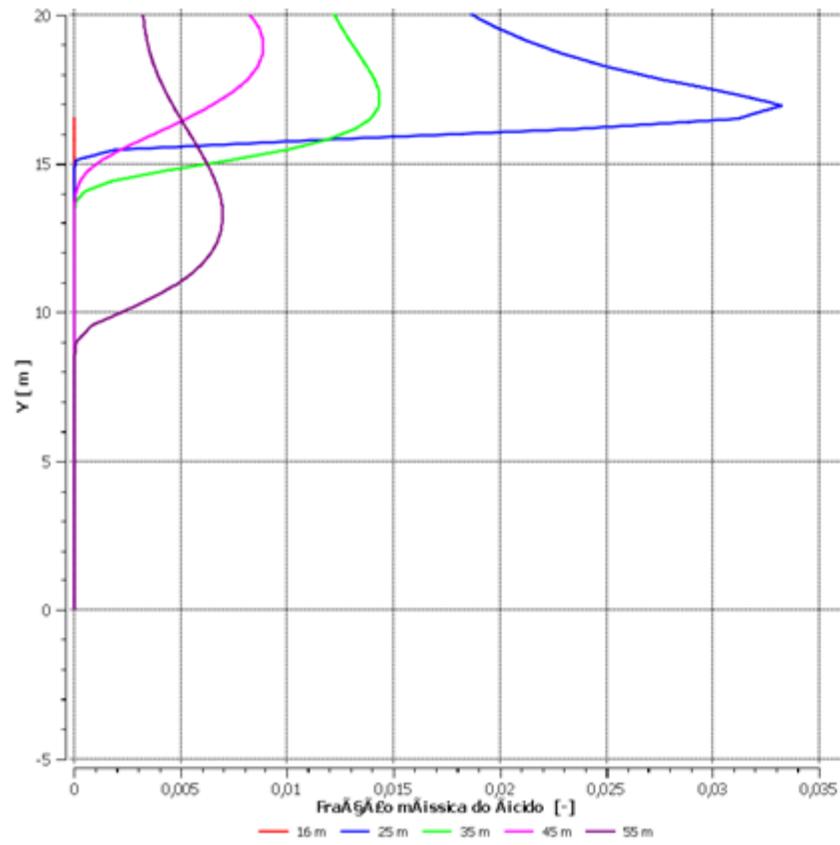
Na Figura 26 estão representados o comportamento dos perfis de fração mássica do produto formado (sulfato de sódio), em função da posição vertical (Y) do domínio de estudo em diferentes posições (16 m, 25 m, 35 m, 45 m e 55 m), para os casos 1 (Figura 26a) e 4 (Figura 26b). É possível observar que a partir da posição de 35 m, nos dois casos estudado, as frações de sulfato de sódio diminuem consideravelmente até atingir o valor nulo, pois a base não consegue atingir uma distância maior para que a reação de neutralização aconteça. Nota-se, igualmente, que o sal formado (sulfato de sódio) tende a se manter próximo a superfície, porém pode mudar de posição de acordo com a mudança do comportamento de corrente de água no domínio de estudo.

Figura 23 – Diferentes posições para ao longo do reservatório.

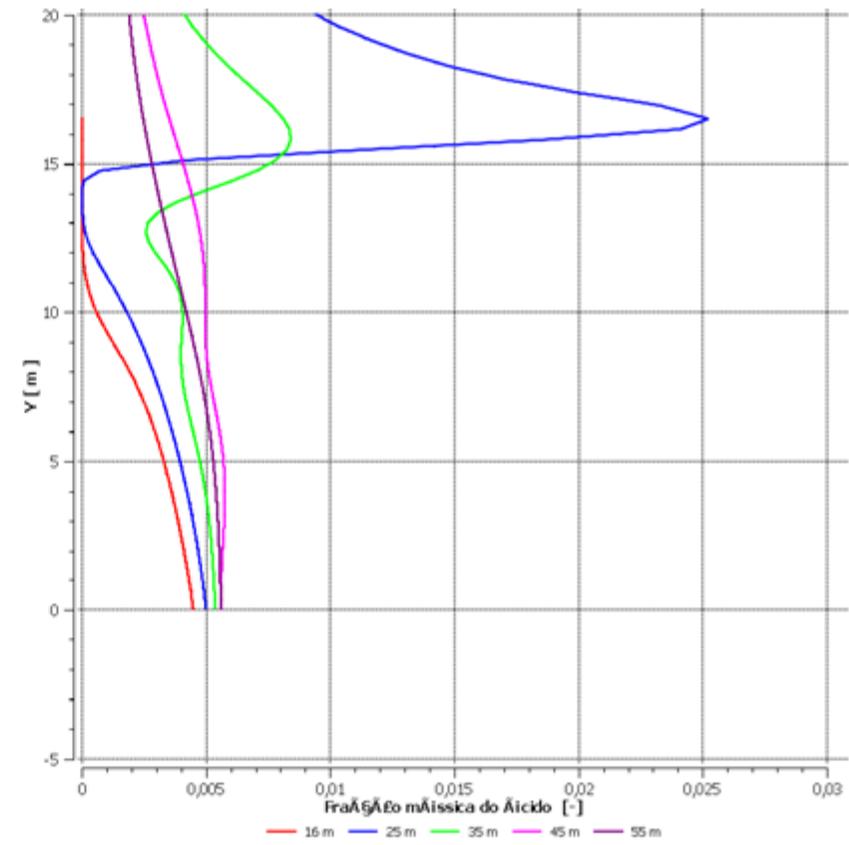


Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Figura 24 – Perfil da fração mássica do ácido em função da altura do reservatório (a) caso 1 e (b) caso 4.



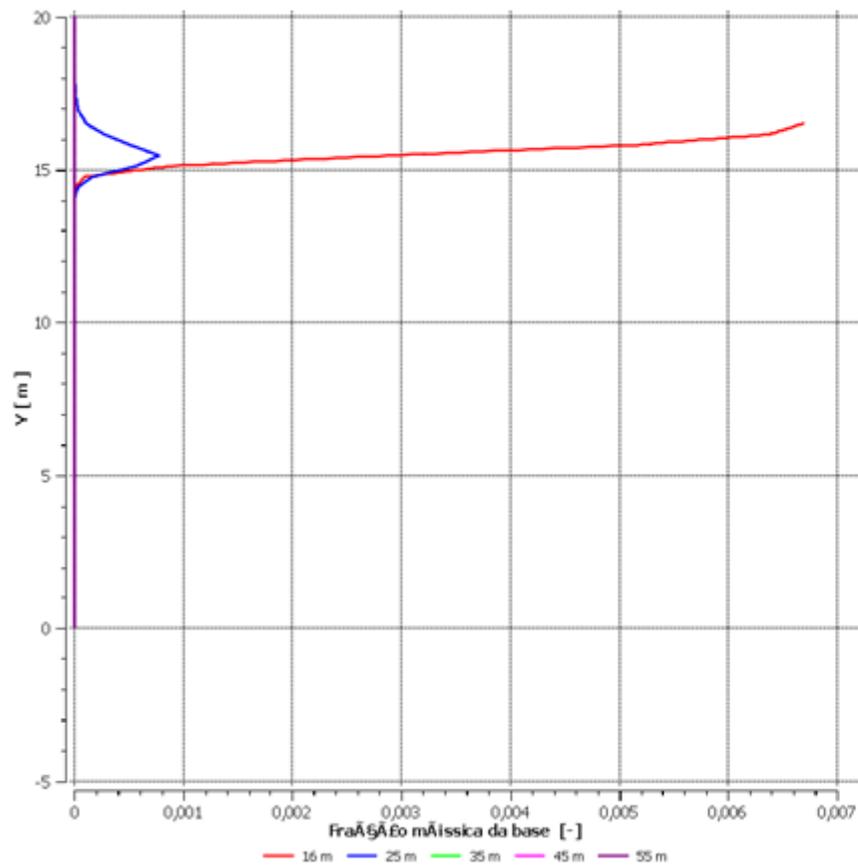
(a)



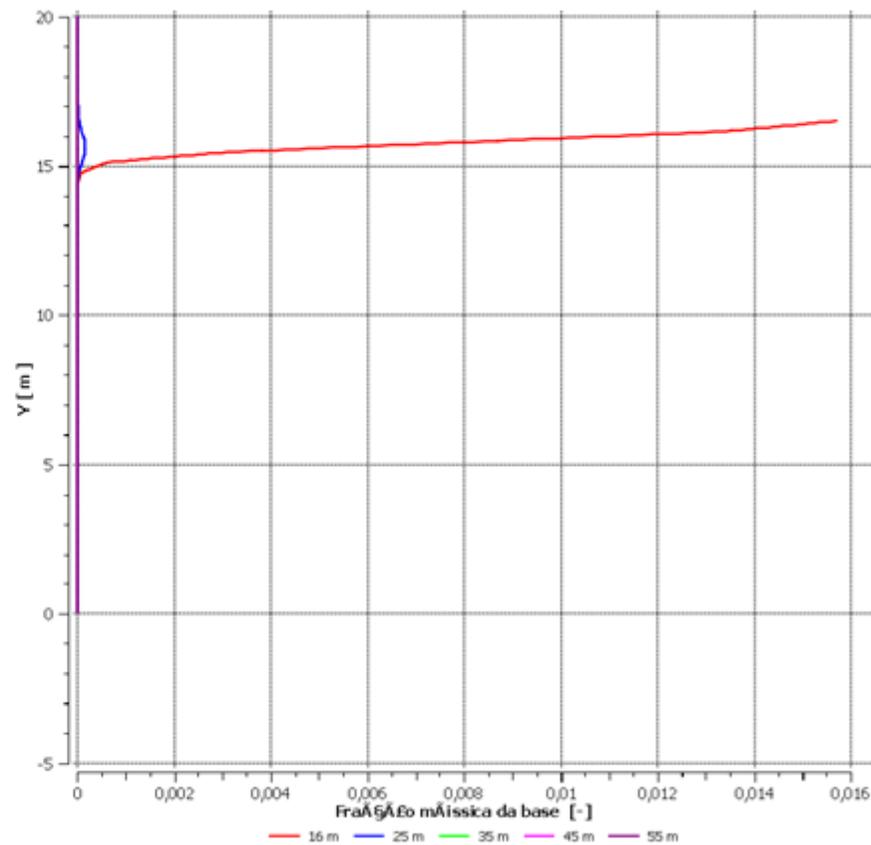
(b)

Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Figura 25 – Perfil da fração mássica da base em função da altura do reservatório.



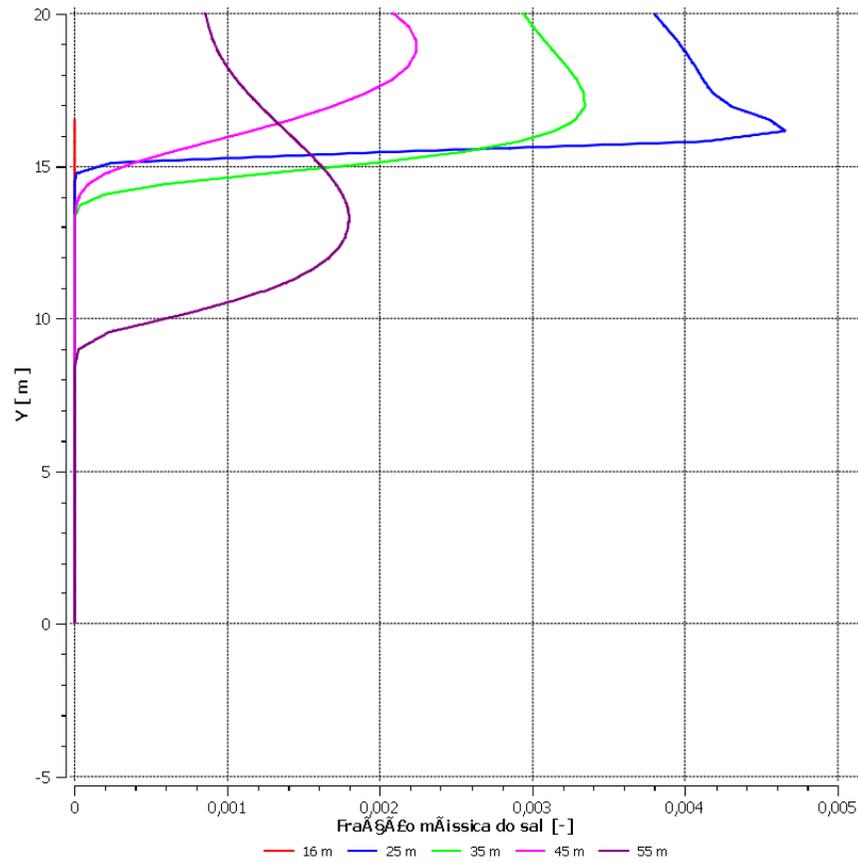
(a)



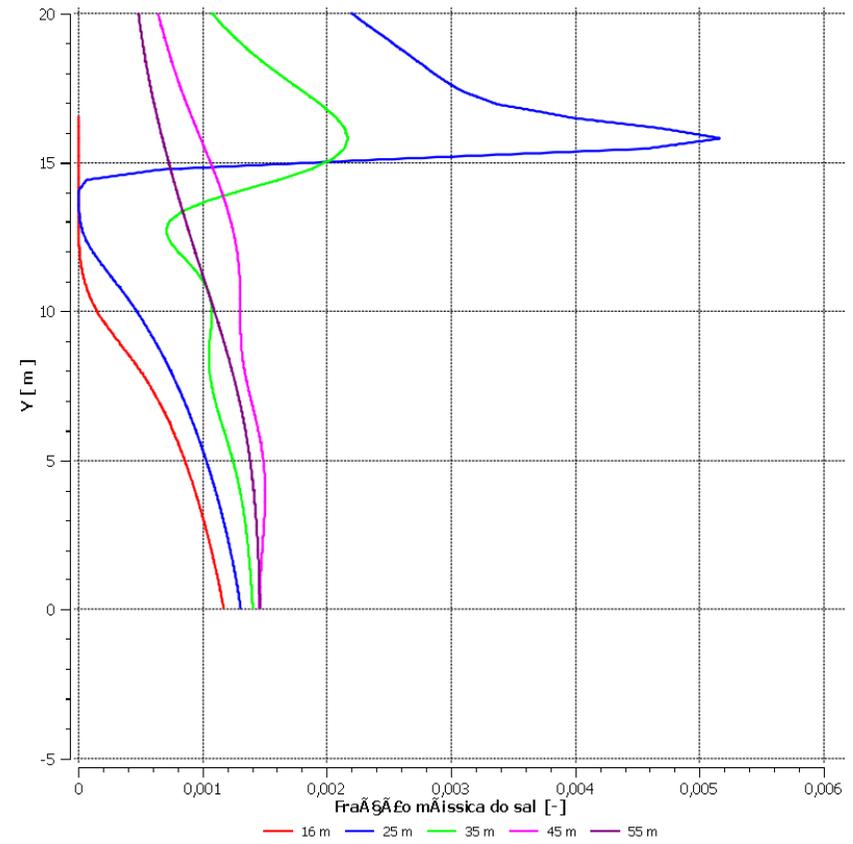
(b)

Fonte: Construído com os dados da pesquisa

Figura 26 – Perfil da fração mássica do sal (sulfato de sódio) formado em função da altura do reservatório.



(a)



(b)

Fonte: Construído com os dados da pesquisa

5 CONCLUSÃO

Com base nos resultados das simulações realizadas foi possível concluir que:

- A modelagem matemática foi capaz de prever numericamente o avanço da pluma dos contaminantes bem como o sal formado (sulfato de sódio);
- A partir da modelagem matemática foi possível representar o pH do sal formado pela reação de neutralização do ácido pela base;
- O alcance da pluma de contaminantes depende, consideravelmente, da velocidade de vazamento e da velocidade de entrada lateral de água no solo;
- Quanto maior a velocidade de escoamento da solução básica maior a fração mássica do produto gerado, ou seja, maior é quantidade gerada de sulfato de sódio;
- Quanto maior a velocidade de escoamento da água menor é a fração mássica de produto gerada, ou seja, menor é a quantidade gerada de sulfato de sódio;
- O comportamento do pH no solo não apresenta uma distribuição equilibrada, sendo que uma maior porção do solo tem um pH ácido.

5.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

- Realizar novas simulações aumentando os valores de velocidade da solução ácida no ponto de vazamento;
- Estudar o comportamento de outros contaminantes ácidos;
- Estudar o comportamento de outros componentes básicos que possam ser utilizados na neutralização do solo;
- Realizar a simulação em uma geometria tridimensional.

REFERÊNCIAS

ABIKO, A; MORAES, O. B. de. **Desenvolvimento Urbano Sustentável**. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2009. 29 p. (Série Texto Técnico, TT/PCC/26). Disponível em: <<http://www.pcc.usp.br/files/files/alex/TT26DesUrbSustentavel.pdf>>. Acesso em: 05 nov. 2019.

AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS (ANA). **Água no mundo: Situação da Água no Mundo**, 2019. Disponível em: <<https://www.ana.gov.br/panorama-das-aguas/agua-no-mundo>>. Acesso em: 01 nov. 2019.

AMBIENTE BRASIL. **Rio é contaminado por ácido da Sanepar no Paraná**, 2004. Disponível em: <<https://noticias.ambientebrasil.com.br/clipping/2004/05/13/14621-rio-e-contaminado-por-acido-da-sanepar-no-parana.html>>. Acesso em: 07 nov. 2019.

ARÊAS, V. F. **Estudo Experimental e Analítico do Transporte de Contaminantes em Meios Porosos**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Departamento de Engenharia Civil, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2006.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 6502: Rochas e solos – Terminologia**. Rio de Janeiro: ABNT, 1995, 18p.

BRADY, N. C.; WEIL, R.R. **Elementos da Natureza e Propriedades dos Solos**. 3 ed. [s.]: Bookman, 2012. 716p.

BONILLO, D.L., **El medio ambiente**, Madrid: Ediciones Cátedra, 1994, 385p.

BOSCOV, M. E. G. **Contribuição ao projeto de sistemas de contenção de resíduos perigosos utilizando solos lateríticos**. 1997. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) - Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1997.

CAMPOS, V. R. ÁCIDO SULFÚRICO. Revista Virtual de Química, n. 3, v. 3, p. 210-214, 2011.

Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB). Solo: Propriedades. Informações básicas, online, 2013. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/solo/propriedades/>>. Acesso em: 22 abr. 2019.

CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE – CONAMA, Resolução nº 420, de 28 de dezembro de 2009. Disponível em <<http://www2.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=620>>. Acesso: 05 nov. 2019.

DELLEUR, J. **The handbook of groundwater engineering**, CRC Press LLC, Indiana, USA, p. 940 (1999).

DEMUELENAERE, R. G. de A. Caracterização de Propriedades de Transporte de Metais Pesados em Solos Residuais do Rio de Janeiro. 2004. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2004.

DEPARTAMENTO DE RECURSOS MINERAIS- DRM-RJ. Águas Subterrâneas, 2019. Disponível em: <<http://www.drm.rj.gov.br/index.php/areas-de-atuacao/3-aguassubterraneas.html>>. Acesso em: 05 dez. 2019.

ELHAKIM, A. F. Estimation of Soil Permeability. Alexandria Engineering Journal, v. 55, n. 3, 2631-2638p, 2016.

ESSS. Fluidodinâmica Computacional: O que é?, 2016. Disponível em: <<https://www.esss.co/blog/fluidodinamica-computacional-o-que-e/>>. Acesso em: 25 nov. 2019.

FABBRIS, E. et al.; POROSIDADE DO SOLO, 2011. Disponível em:<<https://document.onl/documents/porosidade-do-solo-cafwufsmbr-se-comparou-a-esponja-com-o-solo-percebe-se.html>>. Acesso em: 22 abr. 2019.

FARIAS, F. P. M. Estudo Teórico da Termofluidodinâmica em Secadores Ciclônicos. 2006. 150f. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Centro de Ciência e Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2006. Disponível em: <http://dspace.sti.ufcg.edu.br:8080/jspui/handle/riufcg/1631> . Acesso em 2019.

FAVERO, J.L. et al.; Análise teórico-experimental da dispersão de poluentes líquidos em solos. Engenharia Sanitária e Ambiental, v.12, n.4, p. 410-416, 2007.

FETTER, C. W., **Contaminant Hydrogeology**. Macmillan Publishing Company. US. 451p. (1993).

FOGAÇA, J. Reações de Neutralização. Disponível em:<<https://manualdaquimica.uol.com.br/quimica-inorganica/reacoes-neutralizacao.htm>>. Acesso em: 21 ago. 2018.

FREEZE, R. A.; CHERRY, J. A. Groundwater. 1 ed. New Jersey: Prentice Hall, 1979. 604p.

FREITAS, C. U. *et al.* Estratégias de vigilância de um acidente envolvendo planta industrial de produção de ácido sulfúrico. **Cadernos saúde coletiva**, Rio de Janeiro, v. 20, n.4, 2012.

GILHAM, R. W. (1987), Processes of Contaminant Migration in Groundwater. CSCE-CENTENNIAL SYMPOSIUM ON MANAGEMENT OF WASTE CONTAMINATION OF GROUNDWATER, v. 28, n. 7, 239-269 p.

GÜNTHER, H., Poluição de solos. In: PHILIPPI JR. A., PELICIONI M.C. **Educação Ambiental e Sustentabilidade**, São Paulo, Manole, p. 191. (2005).

GUSMÃO, A. D. **Uso de barreiras reativas na remediação de aquíferos contaminados**. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) - Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 1999.

G1. Acidente com caminhão carregado com ácido provoca contaminação, 2011. Disponível em: < <http://g1.globo.com/sao-paulo/sao-jose-do-rio-preto-aracatuba/noticia/2015/08/acidente-com-caminhao-carregado-com-acido-provoca-contaminacao.html>>. Acesso em: 07 nov. 2019.

G1. Marginal Tietê segue interditada quase 12 horas após acidente, 2015. Disponível em: < <http://g1.globo.com/sao-paulo/noticia/2011/12/marginal-tiete-segue-interditada-quase-12-horas-apos-acidente.html>>. Acesso em: 07 nov. 2019.

G1. Navio com ácido sulfúrico afunda no Rio Reno, no oeste da Alemanha, 2011. Disponível em: < <http://g1.globo.com/mundo/noticia/2011/01/navio-com-acido-sulfurico-afunda-no-rio-reno-no-oeste-da-alemanha.html>>. Acesso em: 07 nov. 2019.

HEMERSON, L. **Ácido sulfúrico contamina Rio Piracicaba em Nova Era**, 2012. Disponível em: < https://www.em.com.br/app/noticia/gerais/2012/07/17/interna_gerais,306397/acido-sulfurico-contamina-rio-piracicaba-em-nova-era.shtml>. Acesso em: 07 nov. 2019.

INCROPERA, F. P. *et al.* **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. 6 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008. 643 p.

IRITANI, M. A.; EZAKI, S. **As Águas Subterrâneas do Estado de São Paulo**. 2 ed. São Paulo: Secretária de Estado do Meio Ambiente – SMA, 2008, 104 p. Disponível em: <<http://www.leb.esalq.usp.br/leb/disciplinas/Fernando/leb1440/Aula%208/As%20aguas%20subterraneas%20do%20Estado%20de%20Sao%20Paulo.pdf>>. Acesso em: 01 nov. 2019.

LEGNER, C. Tratamento de águas subterrâneas. **Revista Tratamento de Água e Efluentes (TAE)**, 2013. Disponível em: < <http://www.revistatae.com.br/6378-noticias>>. Acesso em: 01 nov. 2019.

LIMA, V. C. *et al.* **O solo no meio ambiente**: abordagem para professores do ensino fundamental e médio e alunos do ensino médio. 1 ed. Curitiba: Departamento de Solos e Engenharia Agrícola, Universidade Federal do Paraná, 2007. 130 p. Disponível em: <<http://www.escola.agrarias.ufpr.br/arquivospdf/livro.pdf>>. Acesso em: 20 mai. 2019.

MARKETING ECOSOL. **Contaminação do solo e águas subterrâneas**, 2018. Disponível em: < <http://www.fimdolixo.com.br/contaminacao-solo-aguas-subterraneas/>>. Acesso em: 05 nov. 2019.

Ministério da Economia Indústria, Comércio Exterior e Serviços (MDIC). **Comex Vis: Principais Produtos Importados**, 2019. Disponível em: <<http://www.mdic.gov.br/comercio-exterior/estatisticas-de-comercio-exterior/comex-vis/frame-ppi?ppi=3006>>. Acesso em: 07 nov. 2019.

MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE – MMA. **Águas Subterrâneas**: Um recurso a ser conhecido e protegido. Brasília, 2007. 40p.

MIRANDA, H. C. B. de. **Interpretação conjunta de dados de GPR e medidas de permeabilidade sobre um análogo de reservatório siliclástico falhado na bacia de Tucano, NE do Brasil**. Dissertação (Mestrado em Geodinâmica e Geofísica) – Departamento de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2004.

MOREIRA, C. A; BRAGA, A. C. de. O. Aplicação de Métodos Geofísicos no Monitoramento de Área Contaminada Sob Atenuação Natural. **Revista de Engenharia Sanitária e Ambiental**, Rio de Janeiro, v. 14, n. 2, abr. 2009.

NOBRE, M.M.M. **Estudo Experimental do Transporte de Poluentes em Solos Argilosos Compactados**. Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Civil da PUC-RJ. 1987. 214p.

OLIVEIRA, J. B. de. **Estudo paramétrico da contaminação no entorno de um aterro sanitário**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental Urbana) – Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2009.

PALMA, J. B.; ZUQUETTE, L. V. Avaliação do comportamento de frente de contaminação em função dos diferentes valores dos coeficientes de dispersividade. **Boletim Paranaense de Geociências**, Curitiba, n. 56, p. 21-47, 2005.

PARAIBA, L. C.; PULINO, P. **Simulação Numérica da Dispersão-Advecção de Pesticidas no Solo sob Efeito da Temperatura**. 1 ed. Embrapa, 2003. 45p. Disponível em:

<https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/CNPMA/5812/1/documentos_35.pdf>
. Acesso em: 26 nov. 2019.

RENHA, J. F. **Simulação do processo de injeção de soluções poliméricas viscoelásticas na escala de reservatório**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

SANTOS, J. S. de. S. **Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes em Solos. Estudo de Caso: Lagoas de Estabilização**. 2015. 131f. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos), Centro de Ciências e Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2015. Disponível em: <http://dspace.sti.ufcg.edu.br:8080/jspui/handle/riufcg/902> Acesso em 2019.

SILVA, W. T. L. et al. Contaminação do solo: aspectos gerais e contextualização na química ambiental. In: ROSA, André Henrique; FRACETO, Leonardo Fernandes;

MOSCHINI-CARLOS, Viviane (Orgs.). **Meio Ambiente e Sustentabilidade**. 1 ed. Porto Alegre: Bookman, 2012. p. 67-87.

TU, J.; YEOH, G.H.; LIU, C. **Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach**. Butterworth-Heinemann, London, 2008. 35-37.

VALE. Perspectivas do mercado de ácido sulfúrico na visão da Vale Fertilizantes. COBRAS – CONGRESSO BRASILEIRO DE ÁCIDO SULFÚRICO, 2017.

Disponível em: < <http://h2so4.com.br/downloads/COBRAS-2017/COBRAS%202017%20-%20Vale%20Fertilizantes%20-%20Perspectivas%20do%20mercado%20de%20%c3%a1cido%20sulf%c3%barico..pdf> >. Acesso em: 07 nov. 2019.

VASCONCELOS, A. **Transporte de contaminantes em meios porosos saturados e não saturados. Estudo de caso: vazamento de gasolina**. Dissertação (Mestrado em Geotecnia Aplicada a Mineração) – Núcleo de Geotecnia da Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, 2008.

ZHENG, C.; WANG, P. P. **MT3DMS – A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model**. University of Alabama, Tuscaloosa, Alabama, USA, 1999.