

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA**  
**FACULDADE DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL**

**MODELAGEM ANALÍTICA DO TRANSPORTE TRANSIENTE DE GASES EM**  
**MEIO POROSO NÃO SATURADO**

**MOISÉS ANTÔNIO DA COSTA LEMOS**

**ORIENTADOR: PROF. ANDRÉ LUÍS BRASIL CAVALCANTE, D.Sc.**

**COORIENTADOR: PROF. LUCIANO SOARES DA CUNHA, D.Sc.**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM GEOTECNIA**

**PUBLICAÇÃO: G.DM-341/2020**  
**BRASÍLIA/DF: FEVEREIRO/2020**

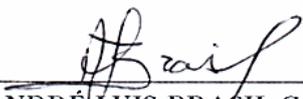
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
FACULDADE DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL

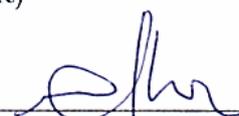
MODELAGEM ANALÍTICA DO TRANSPORTE TRANSIENTE DE GASES EM  
MEIO POROSO NÃO SATURADO

MOISÉS ANTÔNIO DA COSTA LEMOS

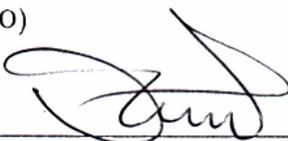
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL  
E AMBIENTAL DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS  
NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE.

APROVADA POR:

  
\_\_\_\_\_  
PROF. ANDRÉ LUIS BRASIL CAVALCANTE, D.Sc. (UnB)  
(ORIENTADOR)

  
\_\_\_\_\_  
PROF. LUCIANO SOARES DA CUNHA, D.Sc. (UnB)  
(COORIENTADOR)

  
\_\_\_\_\_  
PROF. ANTÔNIO CESAR PINHO BRASIL JÚNIOR, D.Sc. (UnB)  
(EXAMINADOR INTERNO)

  
\_\_\_\_\_  
PROF. SANDRO LEMOS MACHADO, D.Sc. (UFBA)  
(EXAMINADOR EXTERNO)

DATA: BRASÍLIA/DF, 14 DE FEVEREIRO DE 2020.

## **FICHA CATALOGRÁFICA**

LEMOS, MOISÉS ANTÔNIO DA COSTA

Modelagem Analítica do Transporte Transiente de Gases em Meio Poroso Não Saturado/ Moisés Antônio da Costa Lemos; orientador: André Luís Brasil Cavalcante; coorientador: Luciano Soares da Cunha. -- Brasília, 2020.

100 p.

Dissertação (Mestrado – Mestrado em Geotecnia) – Universidade de Brasília, 2020.

1. Transporte de gases
2. Aterro Sanitário
3. Modelagem analítica
4. Oxidação do metano

I. Cavalcante, André Luís Brasil, orient.      II. Cunha, Luciano Soares Da, coorient.

III. Mestre

## **REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA**

Lemos, M.A.C. (2020). Modelagem Analítica do Transporte Transiente de Gases em Meio Poroso Não Saturado. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-341/2020, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 100 p.

## **CESSÃO DE DIREITOS**

NOME DO AUTOR: Moisés Antônio da Costa Lemos

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO: Modelagem Analítica do Transporte Transiente de Gases em Meio Poroso Não Saturado

GRAU/ANO: Mestre/2020

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

---

Moisés Antônio da Costa Lemos

Quadra 03 Conj. A casa 49 - Candangolândia

71725-301 - Brasília/DF - Brasil

moisesaclemos@gmail.com

## DEDICATÓRIA

Agradeço primeiramente a Deus, por todas oportunidades e sempre me preparar para os momentos mais desafiadores.

Agradeço aos meus pais, Fátima e Antônio, exemplos que me moldaram e me tornaram o ser humano que me tornei. Agradeço pela confiança depositada em mim e por saber que sempre posso contar com vocês. Aos meus irmãos Murielly e David por me mostrarem que o caminho de trabalho e dedicação nos traz sempre o melhor dos resultados.

Agradeço a minha namorada Hizena por sua cooperação, alegria, paciência e persistência e por confiar que o caminho da ciência é onde sou realizado de todas as formas como ser humano.

Agradeço aos meus companheiros de turma, em especial, Arthur, Márcio, Leillany, Danielli, Thalita, Diego por sempre me ajudarem em todas as horas que precisei.

Agradeço ao grupo GeoFluxo, em especial, Katherine, Manuelle, Mariana, Matheus, Lucas, Luan, por sempre me auxiliarem quando não sabia se havia mais solução.

Agradeço ao professor Luciano por sempre me auxiliar com sua inteligência e principalmente suas habilidades para realizações de ensaios de campo e nas visitas ao Aterro Controlado do Jóquei Clube de Brasília.

Agradeço ao meu amigo, mestre, professor e grande orientador André Luís Brasil Cavalcante. Agradeço pela inspiração, pela sua confiança e por sempre acreditar no meu potencial. Agradeço por me mostrar que a ciência não é algo monótono quando feita de coração. Muito obrigado por tudo.

## RESUMO

Atualmente, a humanidade vem enfrentando diversos problemas por conta dos impactos ambientais, sendo o aquecimento global um dos mais agravantes. A emissão de gases do efeito estufa para atmosfera são advindos de diversas fontes, inclusive da disposição de resíduos sólidos urbanos (RSU) em aterros sanitários. A decomposição anaeróbica da matéria orgânica presente nos resíduos geram um conjunto de gases comumente chamado de biogás. A composição majoritária do biogás é formada por  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$ , sendo ambos gases do efeito estufa, tornando os aterros sanitários uma fonte poluente, caso esses gases sejam liberados para atmosfera. O transporte do biogás ocorre no maciço de RSU e depois pelos drenos e tubulações até os queimadores, enquanto outra parcela podendo ser emitida para a atmosfera a depender do tipo da camada de cobertura do aterro sanitário. Assim, esse trabalho tem por objetivo um estudo sobre o transporte dos principais componentes do biogás, metano ( $\text{CH}_4$ ) e dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), e gases como oxigênio ( $\text{O}_2$ ) e nitrogênio ( $\text{N}_2$ ), presentes com abundância no gás atmosférico. Nessa pesquisa, uma solução analítica do transporte dos gases é proposta, considerando-se, também, a parcela de oxidação do metano devido a reações com oxigênio. A solução analítica do transporte dos gases é validada por meio de um ensaio laboratorial em coluna de solo publicado na literatura. Após a validação, é realizado um estudo paramétrico para entendimento da importância de algumas variáveis para o transporte, emissão e oxidação do  $\text{CH}_4$ . A análise paramétrica é utilizada também como ferramenta para o desenvolvimento de critérios de projeto de camadas de coberturas de aterros sanitários. Por fim, por meio das condições de contorno e iniciais propostas, foi possível prever o comportamento dos gases de modo satisfatório. De modo geral, teve-se uma boa previsão do transporte, emissão e oxidação dos gases tendo assim a criação de uma solução analítica pioneira na previsão do comportamento dos gases em um meio poroso não saturado.

## ABSTRACT

Currently, humanity has been facing several problems due to environmental impacts and global warming is one of the most aggravating. The emission of greenhouse gases into the atmosphere comes from several sources, including the disposal of municipal solid waste (MSW) in landfills. The anaerobic decomposition of the organic matter present in the waste generates a set of gases commonly called biogas. The majority composition of biogas is formed by  $\text{CH}_4$  and  $\text{CO}_2$ , both of which are greenhouse gases, making landfills, a measure adopted in many countries and in Brazil, an effective pollutant if these gases are released into the atmosphere. The transport of biogas takes place in the MSW massif and then through drains and pipes to the burners, while another portion can be emitted into the atmosphere depending on the type of landfill cover layer. Thus, this work aims to study the transport of the main components of biogas, methane ( $\text{CH}_4$ ) and carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ), and gases such as oxygen ( $\text{O}_2$ ) and nitrogen ( $\text{N}_2$ ), present in abundance in atmospheric gas. In this research, an analytical solution for the transport of gases is proposed, also considering the portion of oxidation of methane due to reactions with oxygen. The analytical solution for the transport of gases is validated by means of a laboratory test on a soil column published in the literature. After validation, a parametric study is performed to understand the importance of some variables for  $\text{CH}_4$  transport, emission and oxidation. Parametric analysis is also used as a tool for the development of design criteria for landfill cover layers. Finally, through the proposed boundary and initial conditions, it was possible to predict the behavior of the gases in a satisfactory way. In general, there was a good forecast of the transport, emission and oxidation of gases, thus creating a pioneering analytical solution for predicting the behavior of gases in an unsaturated porous medium.

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1 MOTIVAÇÃO	1
1.2 OBJETIVOS	3
1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	3
<b>2. CAMADAS DE COBERTURA DE ATERROS SANITÁRIOS</b>	<b>6</b>
<b>3. MEIO POROSO NÃO SATURADO</b>	<b>11</b>
3.1 SUCÇÃO	12
3.2 CURVA DE RETENÇÃO DE ÁGUA NO SOLO	15
3.3 CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA NÃO SATURADA	18
<b>4. TRANSPORTE DE GASES EM MEIO POROSO NÃO SATURADO</b>	<b>21</b>
4.1 MECANISMO DE ADVECÇÃO	21
4.2 MECANISMO DE DISPERSÃO HIDRODINÂMICA	23
4.3 LEI DE HENRY	25
4.4 REAÇÕES DE GERAÇÃO OU CONSUMO DE UM GÁS	25
4.5 EQUAÇÃO DA ADVECÇÃO-DISPERSÃO PARA GASES	26
4.6 COEFICIENTE DE DIFUSÃO MOLECULAR DE GASES	28
4.7 VISCOSIDADE DOS GASES	29
4.8 FLUXO DE GÁS ATRAVÉS DE UMA SEÇÃO	32
4.9 ABORDAGENS NUMÉRICAS E ANALÍTICAS PARA SOLUÇÃO DA ADE PARA GASES	33

<b>5. OXIDAÇÃO DO METANO</b>	<b>41</b>
5.1 TEORIA CINÉTICA DE MICHAELIS-MENTEN	41
5.2 TAXA DE OXIDAÇÃO DO METANO (CH <sub>4</sub> )	42
5.3 EFICIÊNCIA DA OXIDAÇÃO DO METANO	45
<b>6. METODOLOGIA</b>	<b>47</b>
6.1 MATERIAL	47
6.2 MÉTODOS	50
6.2.1 RELAÇÕES CONSTITUTIVAS PARA A EQUAÇÃO ADVECÇÃO-DISPERSÃO (ADE) PARA GASES	50
<b>7. DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO</b>	<b>53</b>
7.1 MANIPULAÇÃO MATEMÁTICA PARA SIMPLIFICAÇÃO DA ADE PARA GASES	53
7.1.1 EQUAÇÃO ADVECÇÃO-DISPERSÃO PARA GASES SIMPLIFICADA	56
7.1.2 SOLUÇÃO ANALÍTICA DA ADE PARA GASES SIMPLIFICADA	57
7.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO	59
7.3 PROCESSO ITERATIVO UTILIZADO PARA SOLUÇÃO DA ADE DE GASES	63
<b>8. ANÁLISE E DISCUSSÃO DE RESULTADOS</b>	<b>65</b>
8.1 VALIDAÇÃO DO MODELO	65
8.2 ANÁLISE PARAMÉTRICA DOS PARÂMETROS QUE ALTERAM SIGNIFICATIVAMENTE O TRANSPORTE, OXIDAÇÃO E EMISSÃO DE CH <sub>4</sub>	76

8.2.1 INFLUÊNCIA DA TAXA MÁXIMA DE CONSUMO DE $\text{CH}_4$ ( $V_{\text{MÁX}}$ ) E DA CONSTANTE DA TAXA DE MEIA SATURAÇÃO DO $\text{CH}_4$ ( $K_{\text{CH}_4}$ )	76
8.3 UTILIZAÇÃO DA METODOLOGIA PARA DIMENSIONAMENTO DA ESPESSURA ( $L$ ) DA COBERTURA DE ATERRO SANITÁRIO	82
<b>9. CONCLUSÕES</b>	<b>88</b>
9.1 SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS	89
<b><u>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u></b>	<b>91</b>
<b><u>APÊNDICE A: DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO DA ADE PARA GASES</u></b>	<b>97</b>
<b><u>APÊNDICE B: SIMPLIFICAÇÃO DA ADE PARA GASES</u></b>	<b>99</b>

## Lista de Figuras

Figura 2.1 - Seção típica de um aterro sanitário (Maldaner, 2011).....	6
Figura 2.2 - Sistema de cobertura convencional (Mariano, 2008). ....	8
Figura 2.3 - Sistema de cobertura evapotranspirativa (McCartney e Zornberg, 2004).9	
Figura 3.1 - Diagrama de fases rigoroso e simplificado: (a) diagrama de 4 fases rigoroso, (b) diagrama de 3 fases simplificado (adaptado de Ng e Menzies, 2007). ....	11
Figura 3.2 - Relação entre a umidade relativa do ar e sucção total do solo.....	14
Figura 3.3 - Curva de retenção e suas propriedades chaves (Salinas, 2017, modificado de Vanapalli et al., 1999).....	17
Figura 4.1 - Volume Elementar Representativo (VER). ....	27
Figura 4.2 - Viscosidade de gás puro em diferentes temperaturas.....	32
Figura 4.3 - Integral de colisão dos gases em diferentes temperaturas.....	32
Figura 5.1 - Gráfico da velocidade de reação ( $V_0$ ) por concentração do substrato [S] que obedeça a cinética de Michaelis-Menten (Modificado de Berg et al., 2002).....	42
Figura 5.2 – fator modificado de temperatura e teor de umidade volumétrica .....	44
Figura 6.1 - Experimento Laboratorial de coluna em amostra de solo simulando a oxidação do metano (modificado de Ng et al., 2015). ....	48
Figura 6.2 - Fração molar dos gases no 28° dia de experimento (De Visscher et al., 1999).....	49
Figura 6.3 – Taxa de metano ( $CH_4$ ) retirado/oxidado durante a realização do experimento (De Visscher et al., 1999). ....	50
Figura 6.4 - Metodologia utilizada na pesquisa.....	51

Figura 7.1 - Posições globais utilizada nas soluções analíticas das equações de transporte. ....	60
Figura 7.2 - Posição local das condições de contorno da solução analítica (A) e posição global utilizada e adaptada à solução analítica (B). ....	61
Figura 7.3 – Condições de contorno do CH <sub>4</sub> (esquerda) e condições de contorno do CO <sub>2</sub> (direita).....	62
Figura 7.4 – Condições de contorno do O <sub>2</sub> (esquerda) e condições de contorno do N <sub>2</sub> (direita).....	63
Figura 7.5 – Fluxograma do processo iterativo realizado nessa pesquisa .....	64
Figura 8.1 - Fração molar ao longo da coluna; comparação entre dado experimental (pontos) e calculado pelo método dessa pesquisa (linhas cheias). ....	65
Figura 8.2 – Taxa de CH <sub>4</sub> oxidado ao longo do tempo; comparação entre dado experimental e calculado pelo método dessa pesquisa. ....	67
Figura 8.3 – Relação da concentração de CH <sub>4</sub> x tempo para z = 0, 0.2 e 0.4 metros. ....	67
Figura 8.4 – Relação da concentração de CO <sub>2</sub> x tempo para z = 0, 0.2 e 0.4 metros. ....	68
Figura 8.5 – Relação da concentração de CH <sub>4</sub> x profundidade da cobertura para t = 0.5, 1 e 28 dias. ....	69
Figura 8.6 – Relação da concentração de CO <sub>2</sub> x profundidade da cobertura para t = 0.5, 1 e 28 dias. ....	70
Figura 8.7 – Relação da concentração de O <sub>2</sub> x profundidade da cobertura para t = 0.5, 1 e 28 dias.....	70
Figura 8.8 – Variação da viscosidade do ar calculada ao longo da cobertura.....	71
Figura 8.9 – Variação da velocidade equivalente dos gases ao longo da cobertura. ...	72

Figura 8.10 – Variação do coeficiente de difusão molecular do metano ( $\text{CH}_4$ ) ao longo da coluna para $t = 28$ dias.....	72
Figura 8.11 – Variação do coeficiente molecular do dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) ao longo da coluna para $t = 28$ dias.....	73
Figura 8.12 – Previsão do histórico temporal das taxas de concentração do metano em diferentes posições do solo ensaiado. ....	74
Figura 8.13 – Previsão do histórico temporal das taxas de concentração do dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) em diferentes profundidades do solo ensaiado. ....	75
Figura 8.14 – Previsão da taxa espacial do metano ao longo do tempo no topo da coluna. ....	75
Figura 8.15 – Previsão da taxa espacial do metano ao longo do tempo em diferentes posições. ....	76
Figura 8.16 – Concentração do metano temporal para diferentes $V_{\text{máx}}$ em $z = 0$ metros. ....	77
Figura 8.17 – Concentração do metano ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes $V_{\text{máx}}$ em $t = 28$ dias e $J_{\text{in}} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	77
Figura 8.18 – Concentração do dióxido de carbono ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes $V_{\text{máx}}$ em $t = 28$ dias e $J_{\text{in}} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	78
Figura 8.19 – Concentração do oxigênio ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes $V_{\text{máx}}$ em $t = 28$ dias e $J_{\text{in}} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	78
Figura 8.20 – Concentração do nitrogênio ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes $V_{\text{máx}}$ em $t = 28$ dias e $J_{\text{in}} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ . ....	79

Figura 8.21 – Eficiência da oxidação ao longo da profundidade da cobertura para diferentes $V_{m\acute{a}x}$ em $t = 28$ dias e $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	80
Figura 8.22 – Eficiência da oxidação ao longo da profundidade da cobertura para diferentes $V_{m\acute{a}x}$ em $t = 28$ dias e $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	80
Figura 8.23 – Eficiência da oxidação para diferentes $V_{m\acute{a}x}$ e $K_{CH_4}$ em $t = 28$ dias, $z = 0$ metros e $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	81
Figura 8.24 – Fluxo de $CH_4$ emitido para diferentes $V_{m\acute{a}x}$ ( $\text{mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) e $K_{CH_4}$ em $t = 28$ dias, $z = 0$ metros e $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	81
Figura 8.25 – Eficiência da oxidação em diferentes espessuras da cobertura em $t = 28$ dias e $z = 0$ m considerando: $V_{m\acute{a}x} = 5 \times 10^{-8} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , $K_{CH_4} = 10^{-3}$ , $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	83
Figura 8.26 – Eficiência da oxidação em diferentes espessuras da cobertura e $V_{m\acute{a}x}$ ( $\text{mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) em $t = 28$ dias e $z = 0$ metros para as seguintes propriedades: $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ , $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	83
Figura 8.27 – Eficiência da oxidação ( $O_{ef}$ ) x espessura da cobertura ( $L$ ) x $V_{m\acute{a}x}$ ( $\text{mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) analisadas em $t = 28$ dias e $z = 0$ m considerando-se: $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ , $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .....	84
Figura 8.28 – Eficiência da oxidação ( $O_{ef}$ ) em $t = 28$ dias com parâmetros $V_{m\acute{a}x} = 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ e $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ ao longo da cobertura com espessura de (a) 0.5 metro; (b) 0.75 metro; (c) 1 metro; (d) 1.5 metros.....	85
Figura 8.29 – Eficiência da oxidação para diferentes espessuras da cobertura e $J_{in}$ em $t = 28$ dias e com as seguintes propriedades: $V_{m\acute{a}x} = 2.32 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ .....	86

Figura 8.30 – Eficiência da oxidação em  $z$  com espessura de  $L = 0.5\text{m}$ , diferentes  $J_{in}$  em  $t = 28$  dias e propriedades do solo:  $V_{m\acute{a}x} = 1 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$  e  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3} \dots 87$

## Lista de Tabelas

Tabela 3.1 - Principais curvas de ajuste da curva de retenção de água no solo .....	17
Tabela 3.2 - Principais curvas de ajuste da condutividade hidráulica não saturada ..	19
Tabela 4.1 - Valores da constante de Henry (Ng et al., 2015) .....	25
Tabela 4.2 - Propriedades químicas de gases para o cálculo do coeficiente de difusão molecular. ....	29
Tabela 4.3 - Propriedades química de gases para o cálculo da viscosidade. (Reid et al., 1987).....	32
Tabela 4.4 - Métodos numéricos aplicados na previsão do transporte de gases em meio poroso .....	34
Tabela 4.5 - Métodos analíticos aplicados na previsão do transporte de gases em meio poroso. ....	37
Tabela 6.1 - Parâmetros do solo agrícola utilizado no ensaio de De Visscher et al. (1999) .....	49

## Lista de Abreviações e de Símbolos

Abreviação	Significado
RSU	Resíduo Sólido Urbano
GEE	Gases do Efeito Estufa
$\text{CH}_4$	Metano
$\text{CO}_2$	Dióxido de Carbono
$\text{O}_2$	Oxigênio
$\text{N}_2$	Nitrogênio
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
ET	Evapotranspirativa
ADE	Advection-Dispersion Equation

Símbolo	Significado
$\theta_w$	Teor de umidade volumétrica da água
$V_w$	Volume total de água
$V$	Volume total
$\theta_a$	Teor de umidade volumétrica do ar
$V_a$	Volume total de ar
$\theta_s$	Teor de umidade volumétrica saturada
$\psi$	Sucção total
$R$	Constante universal dos gases
$T$	Temperatura absoluta
$\rho_w$	Densidade da água
$v_{w0}$	Volume específico da água ou o inverso da densidade da água
$\omega_v$	Massa molar do vapor de água
$\bar{u}_v$	Pressão parcial do vapor de água nos poros
$\bar{u}_{i0}$	Pressão de saturação do vapor de água
$u_a$	Pressão de ar no solo

Símbolo	Significado
$u_w$	Pressão da água no solo, ou poropressão
$\pi$	Sucção osmótica do solo
$\Theta$	Teor de umidade volumétrica adimensional
$\theta_s$	Teor de umidade volumétrica residual
$m_a$	Constante para um particular intervalo de tempo durante um processo transiente de infiltração de água no solo
$m_w$	Inclinação da curva de retenção de água no solo
$\sigma_z$	Tensão total na direção $z$
$k_z(\psi)$	Função de condutividade hidráulica não saturada em termos da sucção na direção $z$
$g$	Aceleração da gravidade
$\Phi$	Potencial hidráulico
$J_A$	Fluxo advectivo
$c_k^m$	Concentração do gás $m$ na fase $k$
$v_{zk}$	Velocidade de Darcy fase $k$ na direção $z$
$K$	Permeabilidade intrínseca
$\theta_k$	Teor de umidade volumétrica da fase $k$
$v_{r,zk}$	Velocidade real da fase $k$ na direção $i$
$J_{A,a}$	Mecanismo advectivo de um gás $m$ presente na fase gasosa
$v_{r,za}$	Velocidade de percolação do gás na direção $z$
$c_a^m$	Concentração da substância $m$ na fase gasosa
$J_{A,w}$	Mecanismo advectivo de um gás $m$ solubilizado na água
$v_{r,zw}$	Velocidade de percolação da água na direção $z$

Símbolo	Significado
$c_w^m$	Concentração da substância $m$ solubilizada na água
$D_a^{m,ef}$	Coefficiente de difusão molecular do gás $m$ , na fase gasosa
$J_D$	Transporte por difusão molecular
$D_a^m$	Coefficiente de difusão molecular do gás $m$ em uma seção não obstruída
$\tau$	Fator de tortuosidade do fluxo
$S_w$	Grau de saturação da água
$n$	Porosidade do solo
$H^m$	Constante de Henry do gás $m$
$Q_m$	Representa consumo (<0) ou geração (>0) do gás $m$
$c_t^m$	Concentração total do gás $m$
$\rho_d$	Massa específica seca do solo
$r_m$	Taxa de reação de oxidação do metano para o gás $m$
$J_z$	Fluxo total na direção $z$
$R_m$	Fator de retardamento do gás $m$
$S_i ; S_j$	Volume de difusão atômico para cada componente ( $i$ e $j$ )
$M_i ; M_j$	Massas molares dos gases $i$ e $j$
$X_m ; X_j$	Frações molares dos gases $m$ e $j$
$D_{mj}$	Coefficiente de difusão de gases binários do componente $m$ com todos os outros componentes $j$
$V_{cm}$	Volume crítico do gás $m$
$\Omega_m^*$	Integral de colisão reduzida do gás $m$
$\omega_m$	Fator acêntrico do gás $m$
$T_{cm}$	Temperatura crítica do gás $m$

<b>Símbolo</b>	<b>Significado</b>
$r_{CH_4}$	Taxa de oxidação de $CH_4$
$V_{máx}$	Taxa máxima de consumo de $CH_4$
$f_{V,T}$	Fator modificado de temperatura
$f_{V,m}$	Fator modificado do teor de água
$K_{O_2}$	Constante da taxa de meia saturação do $O_2$
$K_{CH_4}$	Constante da taxa de meia saturação do $CH_4$
$\theta_{wiltmg}$	Teor de umidade volumétrica da água em que a atividade microbiana para a oxidação de metano é insignificante
$\theta_{fc}$	Capacidade de campo do solo, definida como teor de umidade volumétrica da água em que um solo pode reter água sem haver infiltração
$O_{ef}$	Eficiência da Oxidação
$J_{out}$	Fluxo de metano em uma certa posição no solo de cobertura
$J_{in}$	Fluxo de metano introduzido ao sistema
$J_{ox}$	Fluxo de metano oxidado

# 1. INTRODUÇÃO

## 1.1 Motivação

O aumento da população mundial associado aos danos causados por ações antrópicas requer a aplicação de medidas que amenizem e elimine os impactos gerados. Os resíduos sólidos urbanos (RSU) se encontram, atualmente, como um dos principais problemas advindos do grande consumo da humanidade, tornando-se um desafio para a prática sustentável de várias cidades no mundo.

No Brasil, devido ao problema da geração e disposição do RSU, fez-se necessário a criação de várias leis, órgãos e políticas públicas para um melhor controle do RSU e proteção do meio ambiente. Nesse contexto, a Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS), instituída pela Lei nº 12.305/2010 (Brasil, 2010), foi um marco para o início de uma melhor gestão do RSU. O descarte desses resíduos em lixões e aterros controlados foi e vem sendo minimizado nas grandes capitais brasileiras pela exigência da correta disposição do lixo em aterros sanitários (Ribeiro e Lima, 2000).

Entre os danos causados pelo impacto ambiental da disposição do RSU, tem-se a emissão de gases do efeito estufa (GEE) devido a geração de biogás. O biogás, tanto incinerado ou emitido para atmosfera, em aterros sanitários é oriundo de processos de decomposição anaeróbica da matéria orgânica do RSU. O teor de metano ( $\text{CH}_4$ ) encontrado no biogás varia de 50% a 70% v.v., que apresenta também entre 25% e 50% de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ). Além disso, o biogás bruto contém pequenas quantidades de água ( $\text{H}_2\text{O}$ ), oxigênio ( $\text{O}_2$ ), sulfeto de hidrogênio ( $\text{H}_2\text{S}$ ), amônia ( $\text{NH}_3$ ) e outros (Wilken et al., 2017). O controle do biogás não é desejável somente por amenizar o impacto negativo, mas também pela possibilidade de aproveitamento energético.

Nesse contexto, é necessário a aplicação de modelos com boa capacidade preditiva dos fenômenos que geram, consomem e transportam o biogás. Primeiramente, as metodologias mais empregadas são, segundo Pedott e Aguiar (2014), a Metodologia *Landfill Gas Emissions Model* –LandGEM- (USEPA, 2005), a Metodologia *Intergovernmental Panel on Climate Change* - IPCC - (IPCC, 2006), e a metodologia utilizada pela a *United Nations Framework Convention on Climate Change* (UNFCCC), a ACM0001 (UNFCCC, 2012). A partir dessas metodologias, pode-se estimar a concentração e o volume de metano que a matéria orgânica do local tem potencial de gerar. Estes modelos, contudo, não oferecem informações sobre transporte dos gases e o efeito de processos como infiltração e nem mesmo considerações mais acuradas sobre reações que ocorrem com o metano. Entre essas reações a oxidação do metano é a mais relevante, uma vez que a concentração de metano é reduzida devido a reações com o oxigênio (De Visscher e Van Cleemput, 2003).

Por fim, para um estudo detalhado do potencial energético de um aterro sanitário ou até mesmo da eficiência da camada de cobertura para a não emissão do biogás para a atmosfera, é necessário a criação de modelos que avaliem o transporte de gases e reações que diminuam sua concentração, como por exemplo, a oxidação do metano. As abordagens que reproduzem o transporte dos gases, normalmente, levam em consideração a equação de transporte de massa pelos mecanismos advectivos e dispersivos (Bear, 1972). A abordagem tradicional de equação de transporte advectivo e dispersivo se dá pela lei de Darcy em paralelo com a lei de Fick (Metcalf e Farquhar, 1987; Ng et al., 2015; Feng et al., 2017).

## 1.2 Objetivos

O objetivo geral desse trabalho é desenvolver uma solução analítica transiente do transporte de gases que considere o processo de oxidação do metano, fornecendo informações para futuros estudos sobre aproveitamento energético do biogás, potencial oxidativo do metano e critérios de projeto em coberturas de aterros sanitários. Dessa forma, para a realização desse objetivo geral, os seguintes objetivos específicos serão realizados:

- Reunir, analisar e selecionar resultados de ensaios laboratoriais de coluna relacionados com o fluxo e transporte de gases em meios porosos não saturados;
- Reunir, analisar e selecionar resultados de ensaios laboratoriais relacionados com a oxidação do metano ( $\text{CH}_4$ );
- Desenvolver um modelo matemático que forneça uma solução analítica transiente ao transporte de gases;
- Validar o modelo por meio do experimento laboratorial em coluna realizado por De Visscher et al. (1999);
- Realizar uma análise paramétrica quanto aos parâmetros relevantes para o transporte, emissão e oxidação dos gases.

## 1.3 Estrutura da dissertação

O Capítulo 1 trata da introdução, definição dos objetivos da pesquisa e da estrutura dessa dissertação.

No Capítulo 2 é realizado uma breve discussão sobre as camadas de cobertura de aterros sanitários. Discute-se os tipos de cobertura final ou cobertura intermediária onde são depositados os resíduos. Nesse capítulo é dado mais enfoque para o tipo de

cobertura convencional e evapotranspirativa que são compostas por um meio poroso não saturado.

No capítulo 3 faz-se uma breve discussão sobre as principais características de um meio poroso não saturado. Portanto, explica-se sobre os principais índices físicos comumente utilizados para descrevê-lo, sucção total e suas parcelas, curva de retenção de água no solo e condutividade hidráulica não saturada e as principais curvas de ajuste de ambas.

O entendimento do transporte de gases em meio poroso não saturado por meio de processos advectivos e dispersivos se dá pela Equação da Advecção-Dispersão (ADE). Portanto, descreve-se no Capítulo 4 o seu desenvolvimento matemático e os mecanismos de transporte de massa relevantes para o transporte de gases. Apesar da importância de um entendimento geral da ADE para gases, faz-se necessário um levantamento das principais relações constitutivas que regem o transporte de gases em um meio poroso não saturado. Dessa forma, faz-se, também, um levantamento dos métodos numéricos e analíticos utilizados para descrever o transporte de gases em coberturas de aterros sanitários. Além disso, descreve-se as principais relações constitutivas utilizadas nesses métodos.

No capítulo 5 trata-se de maneira geral sobre a reação química e a estequiometria que descreve a oxidação do metano. Trata-se também de uma forma de descrever a taxa de oxidação do metano por meio da teoria cinética de Michaelis-Menten e de uma aplicação da literatura.

A metodologia da pesquisa é apresentada no Capítulo 6.

O Capítulo 7 trata do desenvolvimento matemático utilizado na nova abordagem

analítica. Tem-se também a descrição das principais relações constitutivas que virão a ser utilizadas para descrever o comportamento dos gases. Apresenta-se como serão tratadas matematicamente as condições iniciais, de contorno e o método iterativo utilizado para a solução da ADE para gases.

O Capítulo 8 apresenta a análise e discussão dos resultados. Inicia-se com a validação do modelo em relação a fração molar dos gases ao longo da coluna e da taxa de oxidação do metano no topo da coluna. Em seguida, realiza-se uma análise paramétrica dos principais fatores que contribuem para o transporte, emissão e oxidação do metano em cobertura de aterros sanitários.

Por fim, as conclusões do trabalho e as sugestões para trabalhos posteriores são tratadas no Capítulo 9.

No apêndice A é demonstrado como a equação Advecção-Dispersão para gases foi resumida e trabalhada nessa pesquisa. Assim, os principais mecanismos que compõem o fluxo e transporte de gases são demonstradas.

No apêndice B são resumidos as principais simplificações que foram realizadas na equação Advecção-Dispersão para gases de forma a ser possível a sua solução nessa pesquisa.

## 2. CAMADAS DE COBERTURA DE ATERROS SANITÁRIOS

Os aterros sanitários constituem uma importante área para despejo adequado dos resíduos sólidos urbanos (RSU). A sua importância reside nas preocupações ambientais que o aterro oferece às formas de poluição que os resíduos geram ao meio ambiente. Dessa forma, os aterros sanitários contêm sistemas de impermeabilização para evitar a contaminação do lençol freático pelo lixiviado, drenagem do lixiviado e gases. A cobertura tem a função de evitar infiltração de água e outros contaminantes e emissão de gases para a atmosfera. Na Figura 2.1 encontra-se uma seção típica de aterro sanitário.

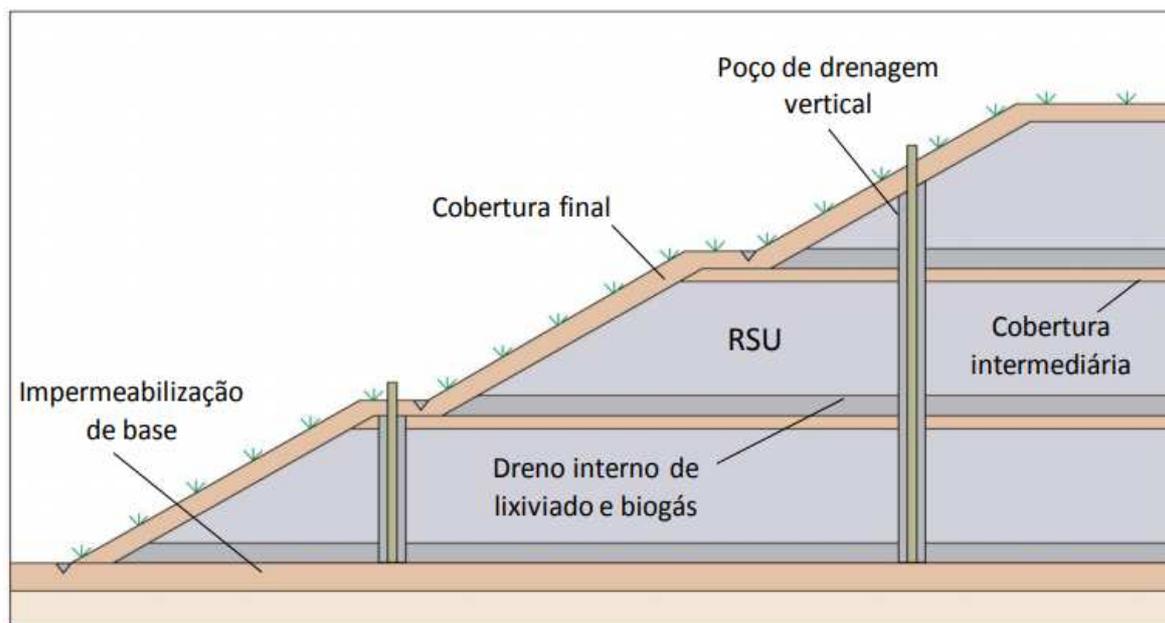


Figura 2.1 - Seção típica de um aterro sanitário (Maldaner, 2011).

Quanto aos impactos gerados pelos aterros sanitários, o lixiviado e os gases gerados pelo processo de decomposição anaeróbica (ausência de oxigênio) da matéria orgânica são os mais impactantes. O conjunto de gases gerados pela decomposição é chamado de biogás e possui concentrações típicas de 50 a 70% de metano ( $\text{CH}_4$ ), 25 a 50% de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), 0 a 7% de nitrogênio ( $\text{N}_2$ ), 0 a 2% de oxigênio ( $\text{O}_2$ ),

0 a 3% de H<sub>2</sub>S e 0 a 1% de hidrogênio (H<sub>2</sub>) (CETESB, 2019). Além disso, o CH<sub>4</sub> e o CO<sub>2</sub> são gases de efeito estufa (GEE) e, por isso, necessitam-se de manejo adequado, sendo o CH<sub>4</sub> até 20 vezes mais eficaz para o fenômeno do efeito estufa do que o CO<sub>2</sub> (Kjeldsen et al., 1997).

Portanto, medidas de controle que garantam a confiabilidade na drenagem eficiente do biogás e que minimize sua emissão para atmosfera são necessárias em aterros sanitários. Assim, as camadas de cobertura (intermediária ou final) são de fundamental importância para que haja o transporte adequado do biogás ou que se garanta o seu isolamento para que não ocorra emissão para atmosfera. Segundo Teixeira (2008), entre os objetivos gerais do sistema de cobertura encontram-se: minimizar a geração de lixiviado após o fechamento do aterro, restringindo a infiltração de água; auxiliar no escoamento superficial de água (sem que haja erosão da cobertura); reduzir ou controlar a emissão de gases para a atmosfera; permitir que o local possa ser utilizado com algum benefício social.

Os tipos de camada de cobertura mais referenciados na literatura são: cobertura convencional (ou resistiva) e cobertura evapotranspirativa (monolíticas ou barreiras capilares) (Catapreta, 2008).

O sistema de cobertura convencional utiliza solos de baixa condutividade hidráulica para minimizar a infiltração da água para a massa de resíduos, já as camadas de coberturas evapotranspirativas utilizam alguns componentes de balanço hídrico para minimizar a infiltração (quanto maior a capacidade de armazenamento do material e da evapotranspiração, menor é o potencial de infiltração através da cobertura) (Costa, 2015).

Nos locais em que se opta pela construção da camada convencional (Figura 2.2) o monitoramento torna-se necessário para garantir a qualidade durante a vida útil do aterro sanitário. A baixa condutividade hidráulica do sistema ocasiona em que durante precipitações uma pequena parcela da água infiltre no solo e o restante escoe na superfície.

Uma das desvantagens da camada de cobertura convencional deve-se ao seu uso em locais de clima semiárido, árido, ou em locais com longos períodos de seca pois a variação térmica facilita o surgimento de fissuras (Fourie e Moonsammy, 2002). Essas fissuras podem vir a aumentar a permeabilidade do solo e inviabilizar a camada executada (Melchior, 1997; Albrecht e Benson, 2001). Por conseguinte, quando empregadas em certos locais resultaram em significativos custos de material e construção (McCartney e Zornberg, 2004).

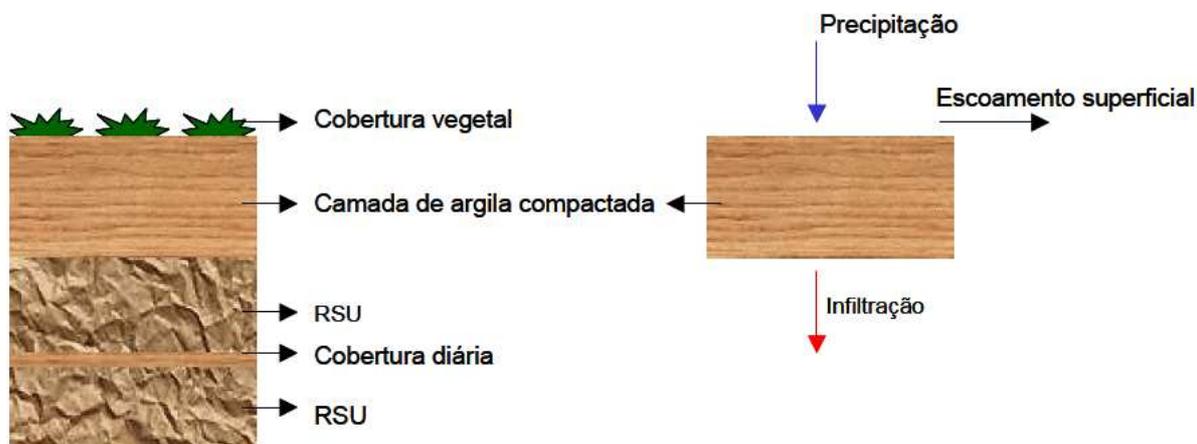


Figura 2.2 - Sistema de cobertura convencional (Mariano, 2008).

No Brasil, as coberturas do tipo convencional são normalmente realizadas com espessuras de 0.60 m, no geral, e construída com materiais de baixa condutividade hidráulica saturada,  $10^{-9} \text{ m s}^{-1}$  ou menor, e acima dessa uma camada de solo em torno de 0.15 m com cobertura vegetal prevenindo a erosão (Catapreta, 2008).

Os projetos de sistemas de cobertura evapotranspirativa (ET) baseiam-se na metodologia dos componentes do balanço hídrico de um aterro sanitário, o qual inclui capacidade de armazenamento de água no solo, precipitação, escoamento superficial, evapotranspiração e infiltração (Figura 2.3). Quanto maior a capacidade de armazenamento de água no solo e suas propriedades evapotranspirativas, menor o potencial de percolação através do sistema de cobertura (Costa, 2015).

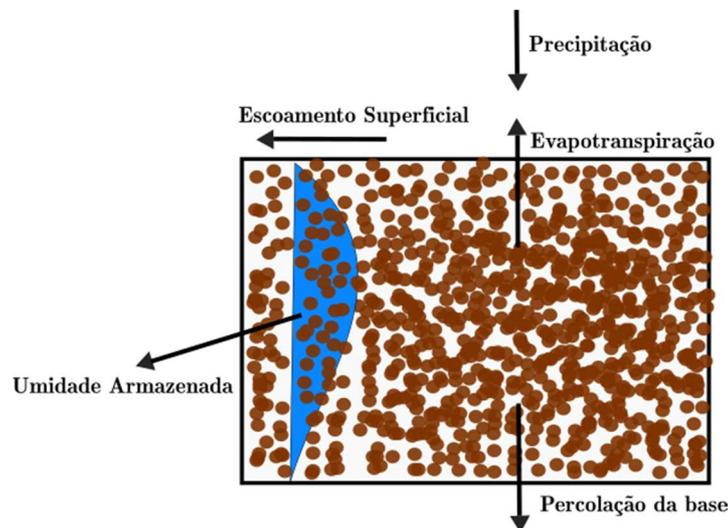


Figura 2.3 - Sistema de cobertura evapotranspirativa (McCartney e Zornberg, 2004).

Algumas das vantagens da cobertura ET sobre o sistema convencional (resistiva) incluem a menor capacidade ao ressecamento e rachaduras durante e após a instalação, construção relativamente simples e baixa manutenção. Além disso, como as coberturas evapotranspirativas podem funcionar corretamente com uma gama razoavelmente ampla de solos, elas são tipicamente construídas usando solos de áreas próximas ao aterro sanitário (McCartney e Zornberg, 2004). Além disso, segundo a USEPA (2003), os sistemas de cobertura ET têm como ênfase os seguintes requisitos de projeto:

- Solos de grão fino, como silte e argila, que possuem uma capacidade de armazenamento de água relativamente alta;

- Vegetação nativa para aumentar a evapotranspiração;

- Solo disponível no local para otimizar a construção e reduzir os custos.

Quanto às desvantagens da cobertura ET vale destacar que certas características do aterro sanitário, como a produção do biogás, pode limitar o uso dessa. O sistema de cobertura pode não controlar adequadamente as emissões do biogás, uma vez que os projetos típicos de cobertura ET não possuem camadas impermeáveis para restringir o transporte do biogás. Caso seja necessário a coleta do biogás no local, pode-se modificar o design da cobertura para capturar e direcionar o gás gerado para incineração no aterro. Além disso, o biogás gerado no aterro sanitário pode limitar a eficácia de uma cobertura ET, porque os gases podem ser tóxicos para a vegetação (USEPA, 2003).

Assim, vê-se que projetos de coberturas de aterros possuem uma execução com solos de baixa permeabilidade e em um estado não saturado. Embora possa haver tipos mais eficientes de coberturas, as coberturas citadas (convencional e ET) podem vir a ser as mais econômicas. Portanto, mostra-se a necessidade de um entendimento de como o biogás comporta-se nesses tipos de materiais.

### 3. MEIO POROSO NÃO SATURADO

O completo entendimento das propriedades dos solos comumente utilizados em obras ou em seu estado natural requer um detalhamento do problema mais próxima possível da realidade. Assim, tratando-se de solos não saturados, tem-se uma divisão do sistema entre as fases sólida, líquida e gasosa e uma quarta fase (película contráctil) devido a interface ar-líquido (Fredlund e Rahardjo, 1993). Dessa forma, o diagrama de fases de um solo não saturado pode ser analisado por meio de um diagrama rigoroso de 4 fases e um simplificado de 3 fases (Figura 3.1). O modelo simplificado é uma hipótese justificável uma vez que a espessura da película contráctil é da ordem de somente algumas camadas moleculares (Ng e Menzies, 2007).

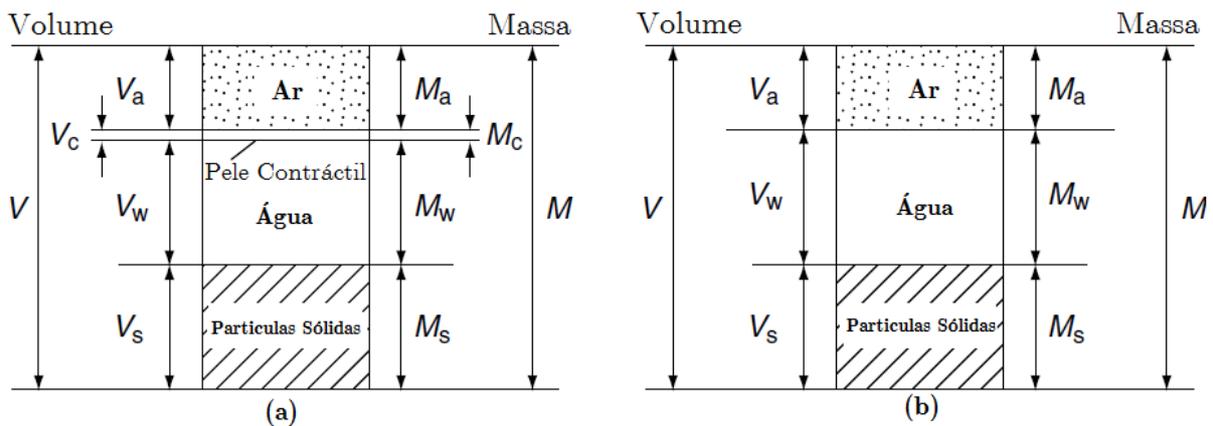


Figura 3.1 - Diagrama de fases rigoroso e simplificado: (a) diagrama de 4 fases rigoroso, (b) diagrama de 3 fases simplificado (adaptado de Ng e Menzies, 2007).

Considerando o diagrama de fase simplificado como um modelo representativo de solos não saturados, os teores de umidade volumétrica da água ( $\theta_w$ ) e ar ( $\theta_a$ ) podem ser obtidos, respectivamente, por:

$$\theta_w = \frac{V_w}{V} \quad (3.1)$$

$$\theta_a = \frac{V_a}{V} \quad (3.2)$$

onde,

$\theta_w$  = teor de umidade volumétrica da água [ $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ ];

$\theta_a$  = teor de umidade volumétrica do ar [ $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ ]

$V_w$  = volume total de água no solo [ $\text{m}^3$ ];

$V_a$  = volume total de ar no solo [ $\text{m}^3$ ];

$V$  = volume total do sistema [ $\text{m}^3$ ].

Além disso, pode-se representar a soma da parcialização dos teores de umidade volumétrica de um solo em que seus vazios estão preenchidos somente por água e ar por:

$$\theta_w + \theta_a = \theta_s \quad (3.3)$$

onde,

$\theta_s$  = teor de umidade volumétrica saturado, situação onde todos os vazios do solo estão preenchidos por água [ $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ ];

O teor de umidade volumétrica da água ( $\theta_w$ ) é um índice físico de grande importância na determinação de propriedades hidráulicas da água. Dessa forma, os valores limites de  $\theta_w$  para os diferentes tipos de solo são denominados de teor de umidade volumétrico saturado ( $\theta_s$ ) e o residual ( $\theta_r$ ). O  $\theta_s$  é a situação em que a água preenche totalmente os vazios do solo. Segundo Camapum de Carvalho et al. (2015),  $\theta_r$  corresponde à quantidade de água armazenada nos poros do material em condição relativamente menos livre do que a água drenada na forma de fluxo líquido.

### 3.1 Sucção

A sucção é um fator de grande importância que afeta o comportamento mecânico e hidráulico de solos não saturados. A sucção quantifica o potencial termodinâmico da

água nos poros do solo relativo a um potencial de referência de água livre. A água livre, neste caso, é definida como a água que não contém solutos dissolvidos, não tendo interações com outras fases que impõe curvatura à interface ar-água e não tendo forças externas que não a gravidade. Os mecanismos físicos e físico-químicos responsáveis pela sucção total do solo são aqueles que diminuem o potencial da água do poro relativo a este estado de referência (Lu e Likos, 2004). A relação termodinâmica entre a sucção do solo (ou a energia livre da água do solo) e a pressão parcial do vapor de água dos poros pode ser escrita da seguinte forma (Fredlund e Rahardjo, 1993):

$$\psi = -\frac{RT}{v_{w0}\omega_v} \ln\left(\frac{\bar{u}_v}{\bar{u}_{v0}}\right) \quad (3.4)$$

onde,

$\psi$  = sucção do solo ou sucção total [kPa];

$R$  = constante universal dos gases [8.31432 J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>];

$T$  = temperatura absoluta [K];

$\rho_w$  = densidade da água [kg m<sup>-3</sup>];

$v_{w0}$  = volume específico da água ou o inverso da densidade da água [m<sup>3</sup> kg<sup>-1</sup>];

$\omega_v$  = massa molar do vapor de água [18.016 kg kmol<sup>-1</sup>];

$\bar{u}_v$  = pressão parcial do vapor de água nos poros [kPa];

$\bar{u}_{v0}$  = pressão de saturação do vapor de água sobre uma superfície plana de água pura à mesma temperatura [kPa].

O termo  $\bar{u}_v / \bar{u}_{v0}$  é chamado de umidade relativa do ar (%). Caso seleciona-se uma temperatura (20 °C, por exemplo), a Eq. (3.4) pode ser reescrita de forma a relacionar a sucção total do solo e a umidade relativa do ar:

$$\psi = -135570 \ln \left( \frac{\bar{u}_v}{\bar{u}_{v0}} \right) \quad (3.5)$$

A Figura 3.2 mostra o gráfico originado pela Eq. 3.4, sendo a relação entre a sucção total do solo e a umidade relativa do ar para as temperaturas de 0, 20 e 40 °C.

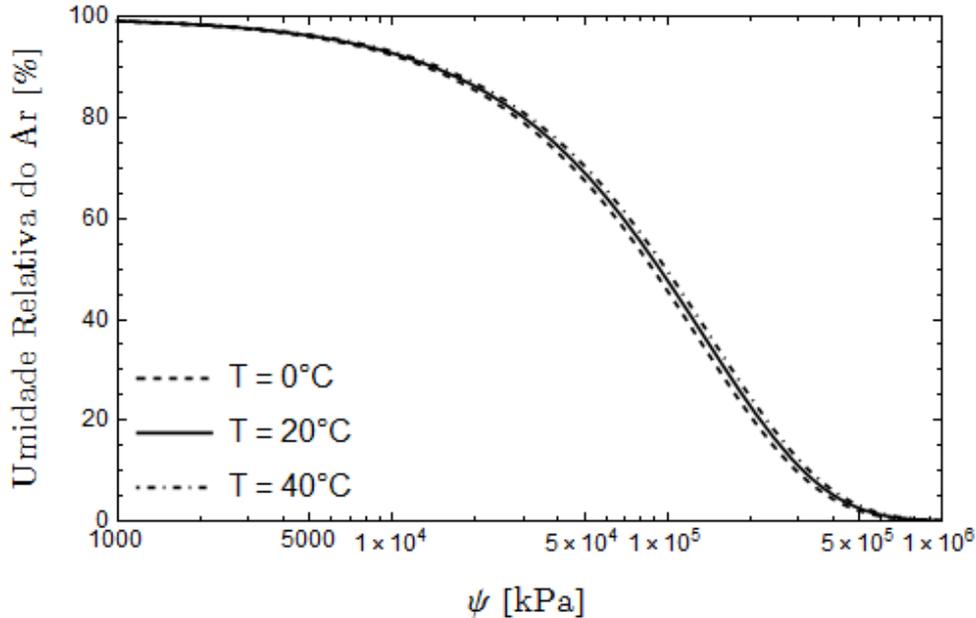


Figura 3.2 - Relação entre a umidade relativa do ar e sucção total do solo.

A sucção total do solo é normalmente dividida em duas parcelas: sucção mátrica e sucção osmótica. O termo mátrica reflete o uso do termo matriz, que se destina a descrever o componente de sucção decorrente de interações entre a água do poro e os sólidos do solo, ou matriz do solo (Lu e Likos, 2004). A sucção osmótica é decorrente da presença de solutos dissolvidos (sais) na água (Camapum de Carvalho et al., 2015). A sucção total do solo é geralmente considerada a soma algébrica dos componentes matriciais e osmóticos, que podem ser escritos da seguinte forma:

$$\psi = (u_a - u_w) + \pi \quad (3.6)$$

onde,

$u_a - u_w$  = sucção mátrica do solo [kPa];

$u_a$  = pressão de ar no solo [kPa];

$u_w$  = pressão da água no solo, ou poropressão [kPa];

$\pi$  = sucção osmótica do solo [kPa].

Além disso, a parcela de sucção osmótica normalmente não é considerada uma vez que a sucção mátrica tem grande contribuição no comportamento mecânico do solo. No entanto, mesmo a resistência de um solo não saturado sendo controlado principalmente pela sucção matricial, a presença de sais na água do solo pode dar origem a algumas mudanças fundamentais no comportamento mecânico (Alonso et al., 1987).

### 3.2 Curva de Retenção de Água no Solo

As propriedades dos solos e seus mecanismos físicos e físico-químicos, os quais são responsáveis pela sucção do solo, dependem do teor de umidade volumétrica da água no solo. Dessa forma, para valores muito baixos de  $\theta_w$  os quais estão relacionado com altos valores de sucção, a água dos poros encontra-se, principalmente, na forma de filmes finos nas superfícies das partículas, sendo os mecanismos de adsorção que contribuem para a sucção (Lu e Likos, 2004). Além disso, segundo Edlefsen e Anderson (1943), o valor de sucção máximo é em torno de  $10^6$  kPa, o qual representa o valor teórico em que o solo está completamente seco. De forma contrária, para valores altos de  $\theta_w$ , relacionado com baixos valores de sucção, o mecanismo dominante de retenção torna-se a capilaridade, governada pelas estruturas das partículas e poros e a distribuição granulométrica do solo.

A relação entre o teor de umidade volumétrica da água e a sucção constitui um importante mecanismo do comportamento de solos não saturados. A curva de retenção

de água no solo define a relação entre a sucção do solo e o teor de umidade volumétrica da água ( $\theta_w$ ). Relações teóricas e empíricas são disponíveis para modelar as propriedades de solos não saturados como o coeficiente de permeabilidade e a resistência ao cisalhamento usando a curva de retenção de água no solo e as propriedades dos solos saturados (Vanapalli et al., 1999).

Vanapalli et al. (1999) descrevem os pontos chaves da curva de retenção de água no solo e seus significados físicos (Figura 3.3). Primeiramente, o valor de entrada de ar representa a diferença de pressão entre o ar e a água necessária por causar a drenagem dos maiores poros do solo. O valor de entrada de ar é obtido estendendo a porção de inclinação constante da curva de retenção até que intercepta o eixo da sucção no valor correspondente ao solo saturado ( $\theta_s$ ). Além disso, os autores descrevem três zonas identificáveis no processo de drenagem do solo: a zona limite de entrada de ar, a zona de transição e a zona de saturação residual.

Na literatura é possível identificar vários autores que propuseram relações entre o teor de umidade volumétrica da água ( $\theta_w$ ) e a sucção ( $\psi$ ) (Gardner, 1958; Brooks e Corey, 1964; Van Genuchten, 1980; Cavalcante e Zornberg, 2017). Assim, na Tabela 3.1 encontram-se resumido as equações propostas para o ajuste da retenção de água no solo expressas em termos do teor de umidade volumétrica adimensional ( $\Theta$ ) (Van Genuchten, 1980), dado por:

$$\Theta = \frac{\theta_w - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (3.7)$$

A curva de retenção de água no solo pode ser utilizada para determinar importantes propriedades hidráulicas do solo. Para um elemento de solo isotrópico,

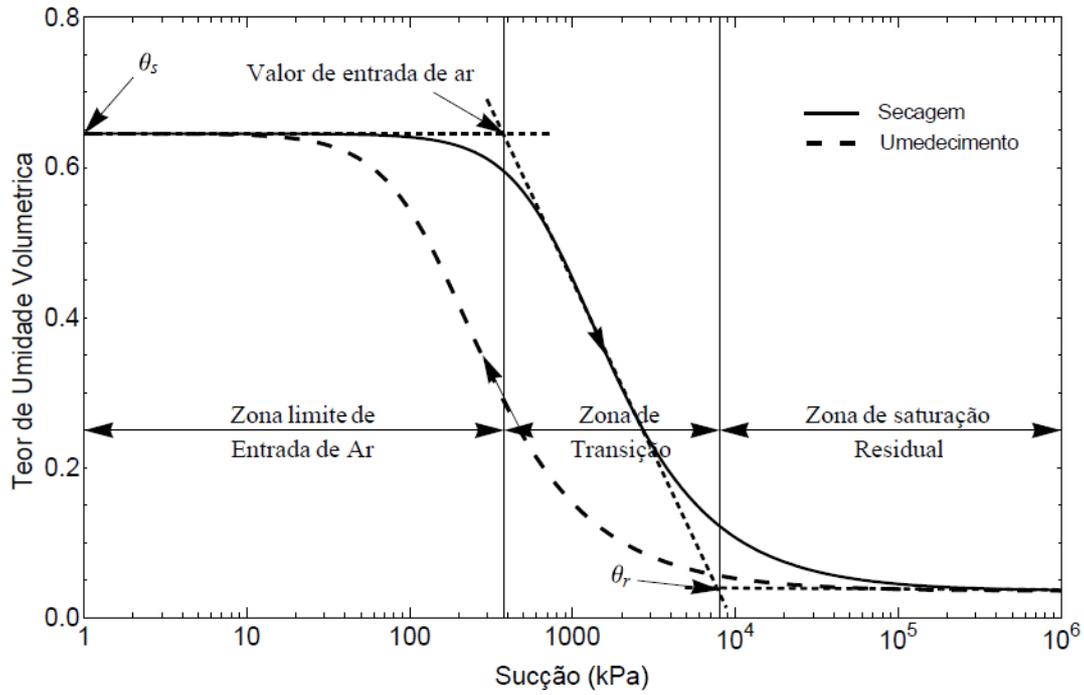


Figura 3.3 - Curva de retenção e suas propriedades chaves (Salinas, 2017, modificado de Vanapalli et al., 1999).

Tabela 3.1 - Principais equações propostas para o ajuste da curva de retenção de água no solo.

Modelo	$\Theta(\psi)$	$\psi(\Theta)$	Parâmetros de Ajuste
Gardner (1958)	$\Theta(\psi) = (1 + \alpha_g \psi^{n_g})^{-1}$	$\psi(\Theta) = \sqrt[n_g]{\frac{1 - \Theta}{\alpha_g \Theta}}$	$\alpha_g$ e $n_g$
Brooks & Corey (1964)	$\Theta(\psi) = (\alpha_{bc} \psi)^{-\lambda_{bc}}$	$\psi(\Theta) = \frac{\Theta^{-1/\lambda_{bc}}}{\alpha_{bc}}$	$\alpha_{bc}$ e $\lambda_{bc}$
Van Genuchten (1980)	$\Theta(\psi) = \left[ 1 + (\alpha_{vg} \psi)^{n_{vg}} \right]^{-m_{vg}}$	$\psi(\Theta) = \frac{1}{\alpha_{vg}} \sqrt[n_{vg}]{\Theta^{-1/m_{vg}} - 1}$	$\alpha_{vg}$ , $n_{vg}$ e $m_{vg} = \frac{n_{vg} - 1}{n_{vg}}$
Cavalcante e Zornberg (2017)	$\Theta(\psi) = \exp(-\delta_{cz} \psi)$	$\psi(\Theta) = \frac{1}{\delta_{cz}} \ln(\Theta)$	$\delta_{cz}$

unidimensional e não saturado, a relação constitutiva para a fase água pode ser descrita por (Lam et al., 1987):

$$d\theta_w = m_a d(\sigma_z - u_a) + m_w d(u_a - u_w) \quad (3.8)$$

onde,

$m_a$  = constante para um particular intervalo de tempo durante um processo transiente de infiltração de água no solo [adimensionais];

$m_w$  = inclinação da curva de retenção do solo, dado por  $\frac{d\theta_w}{d\psi}$  [ $LT^2M^{-1}$ ].

$\sigma_z$  = tensão total na direção  $z$  [kPa].

Assumindo-se que nenhum carregamento externo é adicionado durante o processo transiente de infiltração de água no solo e que a fase gasosa é constante na zona não saturada, a seguinte relação pode ser estabelecida (Ng e Shi, 1998):

$$du_w = \frac{1}{m_w} d\theta_w \quad (3.9)$$

### 3.3 Condutividade hidráulica não saturada

Denomina-se curva de condutividade hidráulica não saturada, a representação gráfica da função que relaciona a condutividade hidráulica do solo não saturado com o seu correspondente teor de umidade volumétrica ou sucção total. Em solos não saturados, a condutividade hidráulica ( $k_w$ ) depende da estrutura e dimensão dos poros e inclusive do teor de umidade volumétrica da água e do histórico de saturação (Masrouri et al., 2008). Da mesma forma que a curva de retenção de água no solo, diversos autores propuseram equações para se estimar a condutividade hidráulica não saturada relacionando-a com a sucção ou com o teor de umidade volumétrica (Gardner, 1958; Brooks e Corey, 1964; Van Genuchten, 1980; Cavalcante e Zornberg, 2017). Dessa forma, a Tabela 3.2 apresenta algumas curvas propostas para a estimativa da condutividade hidráulica não saturada.

Tabela 3.2 - Principais curvas propostas para a estimativa da condutividade hidráulica não saturada

Modelo	$k_z(\psi)$	$k_z(\Theta)$	Parâmetros de Ajuste
Gardner (1958)	$k_z(\psi) = k_s \exp(-\alpha_g \psi)$	$k_z(\Theta) = k_s \exp\left[-\alpha_g \left(\frac{1-\Theta}{\alpha_g \Theta}\right)^{\frac{1}{n_g}}\right]$	$\alpha_g$ e $n_g$
Brooks & Corey (1964)	$k_z(\psi) = k_s \left[ (\alpha_{bc} \psi)^{-(2+4\lambda_{bc})} \right]$	$k_z(\Theta) = k_s \left[ \Theta^{(2/\lambda_{bc} + 4)} \right]$	$\alpha_{bc}$ e $\lambda_{bc}$
Van Genuchten (1980)	$k_z(\psi) = \frac{k_s \sqrt{1 + (\alpha_{vg} \psi)^{n_{vg}}}}{\left(1 - \left(1 - \left(1 + (\alpha_{vg} \psi)^{n_{vg}}\right)^{-m_{vg}}\right)^{\frac{1}{m_{vg}}}\right)^{-2}}$	$k_z(\Theta) = \frac{k_s \sqrt{\Theta}}{\left(1 - \left(1 - \Theta^{\frac{1}{m_{vg}}}\right)^{m_{vg}}\right)^{-2}}$	$\alpha_{vg}$ , $n_{vg}$ e $m_{vg} = \frac{n_{vg} - 1}{n_{vg}}$
Cavalcante & Zornberg (2017)	$k_z(\psi) = k_s \exp(-\delta_{cz}  \psi )$	$k_z(\Theta) = k_s \Theta$	$\delta_{cz}$

A equação usada comumente na engenharia geotécnica para calcular a velocidade em um meio poroso não saturado é a Lei de Darcy-Buckingham (Buckingham, 1907).

Pode-se descrever essa lei para direção  $z$  da forma:

$$v_{zw} = -\frac{k_z(\psi)}{g} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad (3.10)$$

onde,

$k_z(\psi)$  = função de condutividade hidráulica não saturada em termos da sucção na direção  $z$  [ $\text{m s}^{-1}$ ];

$g$  = aceleração da gravidade [ $\text{m s}^{-2}$ ];

$\Phi$  = potencial hidráulico [ $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$ ], que é definido por:

$$\Phi = -gz + \frac{\psi}{\rho_w} \quad (3.11)$$

## 4. TRANSPORTE DE GASES EM MEIO POROSO NÃO SATURADO

O entendimento do processo de transporte de gases em meio poroso não saturado é de suma importância em estudos de aterro sanitários, extração de petróleo, remediação de áreas contaminadas por gases nocivos e outros. Nesses casos, um gás (nessa pesquisa simbolizado por  $m$ ) pode estar presente na fase gasosa, que pode ser composta por um infinidade de outros gases (nocivos ou não), ou solubilizado em água.

Assim, o transporte de gases em meio poroso não saturado é dependente de certos mecanismos do fluxo de massa. Os mecanismos de transporte de massa podem ser divididos entre o transporte advectivo, transporte dispersivo (dispersão mecânica e difusão molecular) e de processos onde há geração ou consumo dos gases. Dessa forma, por meio desses mecanismos, as concentrações de diversos gases podem ser calculados em diferentes fases. Levando em conta esses mecanismos, o transporte de gases em solos não saturados pode ser analisado por meio dos mecanismos do transporte de massa e da equação da advecção-dispersão (ADE).

### 4.1 Mecanismo de Advecção

No transporte advectivo, o soluto é transportado em função do movimento do fluido intersticial. A massa de uma substância dissolvida no fluido é transportada em uma direção pois existe um fluxo devido a um gradiente de energia. Nos estudos do transporte de gases o mecanismo advectivo está relacionado à fase gasosa (mistura de gases) e da água (gás pode estar solubilizado). A advecção de qualquer fase (água ou gasosa) na direção  $z$  em um meio poroso não saturado pode ser descrita como (Bear e Cheng, 2010):

$$J_A = v_{zk} c_k^m \quad (4.1)$$

onde,

$c_k^m$  = concentração do gás  $m$  na fase  $k$  (água ou gasosa) [ $\text{mol m}^{-3}$ ];

$v_{zk}$  = velocidade de Darcy [ $\text{m s}^{-1}$ ] da fase  $k$ , na direção  $z$ . No presente trabalho serão usado os subíndices  $w$  e  $a$  para representar a fase líquida (água) e gasosa, respectivamente.

A lei de Darcy para água foi descrita no capítulo anterior e dada pela Eq. (3.10). De forma semelhante, a lei de Darcy, desconsiderando efeitos gravitacionais, que descreve a velocidade da fase gasosa é descrita por (Parker, 1989; Ho e Webb, 2000; Townsend et al., 2005) :

$$v_{za} = -\frac{K}{\mu_a} \frac{\partial u_a}{\partial z} \quad (4.2)$$

onde,

$K$  = permeabilidade intrínseca [ $\text{m}^2$ ];

$\mu_a$  = viscosidade da mistura de gases [ $\text{kPa s}$ ];

$u_a$  = pressão relativa da fase gasosa [ $\text{kPa}$ ].

Além disso, a velocidade de Darcy pode ser reescrita na forma de velocidade real nos poros:

$$v_{zk} = \theta_k v_{r,zk} \quad (4.3)$$

onde,

$\theta_k$  = teor de umidade volumétrica da fase  $k$  [ $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ ];

$v_{r,zk}$  = velocidade real da fase  $k$  na direção  $z$  [ $\text{m s}^{-1}$ ].

Devido ao transporte de um gás ser influenciado tanto pelo mecanismo advectivo da fase gasosa quanto da fase líquida (água), é necessário diferenciá-los. O mecanismo

advectivo de um gás  $m$  presente na fase gasosa ( $J_{A,a}$ ) pode ser descrito utilizando as Eqs. (4.1) e (4.3):

$$J_{A,a} = \theta_a v_{r,za} c_a^m \quad (4.4)$$

onde,

$c_a^m$  = concentração molar do gás  $m$  presente na fase gasosa [ $\text{mol m}^{-3}$ ];

$v_{r,za}$  = velocidade real da fase gasosa na direção  $z$  [ $\text{m s}^{-1}$ ].

Da mesma forma, o mecanismo advectivo de um gás  $m$  solubilizado na água ( $J_{A,w}$ ), pode ser descrito por:

$$J_{A,w} = \theta_w v_{r,zw} c_w^m \quad (4.5)$$

onde,

$c_w^m$  = concentração do gás  $m$  solubilizada na água [ $\text{mol m}^{-3}$ ];

$v_{r,zw}$  = velocidade de percolação da água na direção  $z$  [ $\text{m s}^{-1}$ ].

## 4.2 Mecanismo de Dispersão Hidrodinâmica

O mecanismo dispersivo (dispersão hidrodinâmica) é composto pela dispersão mecânica e pela difusão molecular. A dispersão mecânica ocorre na escala macroscópica e está associada a movimentação do contaminante, ocorrendo durante a advecção. Portanto, de forma geral, consiste na dispersão do contaminante causado pela heterogeneidade das velocidades no movimento do fluido e pelos diversos caminhos percorridos pelo fluido.

A difusão molecular é um processo microscópico (escala molecular) e é a consequência da movimentação aleatória das moléculas do soluto. A difusão molecular ocorre sem a necessidade do fluido estar em movimento e o contaminante migra de um

ponto de maior concentração para um de menor concentração.

Segundo Elberling et al. (1994), a difusão molecular é juntamente com a advecção, os mecanismos de maior relevância no transporte de gases. O mecanismo de difusão molecular é desprezível para o transporte dos gases solubilizados na fase líquida (água). Ou seja, o mecanismo da advecção é o único mecanismo relevante no transporte dos gases solubilizados em água.

Assim, para um gás qualquer ( $m$ ), desconsiderando a dispersão mecânica, e levando-se em conta o balanceamento do sistema, o transporte por difusão molecular, ( $J_D$ ), (Bird et al., 1960) é descrito por:

$$J_D = -\theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} \quad (4.6)$$

onde,

$D_a^{m,ef}$  = coeficiente de difusão molecular do gás  $m$ , na fase gasosa [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ].

Além disso, pode-se descrever o coeficiente de difusão molecular de um gás ( $m$ ) em meio poroso ( $D_a^{m,ef}$ ) da forma:

$$D_a^{m,ef} = \tau D_a^m \quad (4.7)$$

onde,

$D_a^m$  = coeficiente de difusão molecular do gás  $m$  em uma seção não obstruída [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ];

$\tau$  = fator de tortuosidade do fluxo [Adimensional], o qual pode ser descrito segundo a proposta de Millington (1959):

$$\tau = \left[ \left( 1 - S_w \right)^{\frac{10}{3}} \right] n^{\frac{4}{3}} \quad (4.8)$$

onde,

$S_w$  = grau de saturação da água [ $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ ];

$n$  = porosidade do solo [ $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ ].

### 4.3 Lei de Henry

Nos estudos do transporte de gases, a noção da solubilidade dos contaminantes em água torna-se de grande importância pelo retardamento que a água pode ocasionar. Uma maneira de relacionar a solubilidade de um gás em água é utilizando a Lei de Henry. Segundo Reid et al. (1987), quando a solubilidade é pequena e a velocidade de fluxo é baixa o suficiente a Lei de Henry pode ser utilizada e podendo ser representada por:

$$H^m = \frac{C_w^m}{C_a^m} \quad (4.9)$$

onde,

$H^m$  = constante de Henry do gás  $m$  em uma dada temperatura e para baixas pressões [adimensional];

Valores da constante de Henry de alguns gases constam na Tabela 4.1:

Tabela 4.1 - Valores da constante de Henry (Ng et al., 2015)

Substância	Constante de Henry ( $H^m$ )
Metano ( $\text{CH}_4$ )	0.0316
Dióxido de Carbono ( $\text{CO}_2$ )	0.8145
Oxigênio ( $\text{O}_2$ )	0.0318
Nitrogênio ( $\text{N}_2$ )	0.0159

### 4.4 Reações de geração ou consumo de um gás

O transporte de um gás ( $m$ ) conservativo é aquele onde os gases dissolvidos em uma fase  $k$  qualquer (água ou gasosa) não sofrem perdas devido a processos físicos, químicos e bioquímicos. Porém, no estudo do transporte de gases é comum haver a não conservação devido a esses processos. Assim, o balanço de massa quando há reações

químicas e não há conservação da substância pode ser descrito por (Van Genuchten et al., 2013):

$$\frac{\partial c_t^m}{\partial t} = \pm Q_m \quad (4.10)$$

onde,

$t$  = tempo [s];

$Q_m$  = representa consumo ( $<0$ ) ou geração ( $> 0$ ) do gás  $m$  [ $\text{mol m}^{-3}\text{s}^{-1}$ ];

$c_t^m$  = concentração total do gás  $m$  [ $\text{mol m}^{-3}$ ], sendo essa relacionada à concentração na fase gasosa e à concentração solubilizada em água, podendo ser representada por:

$$c_t^m = \theta_w c_w^m + \theta_a c_a^m \quad (4.11)$$

Além disso, nos estudos do transporte de gases em aterros sanitários, a oxidação do metano (discutida no capítulo 5) é a reação de maior relevância. Portanto, a conservação de massa devido ao fenômeno de oxidação do metano pode ser indicada por:

$$\frac{\partial [\theta_w c_w^m + \theta_a c_a^m]}{\partial t} = \pm \rho_d r_m \quad (4.12)$$

onde,

$\rho_d$  = massa específica seca do solo [ $\text{kg m}^{-3}$ ];

$r_m$  = taxa de geração ou consumo do gás  $m$  devido a oxidação do metano [ $\text{mol kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ ].

#### 4.5 Equação da Advecção-Dispersão para gases

O transporte de massa de um gás em um solo não saturado pode ser matematicamente descrito pela sua conservação de massa. Assim, considerando um volume elementar representativo (VER) do meio poroso de dimensões  $dx$ ,  $dy$  e  $dz$

(Figura 4.1), faz-se necessário quantificar o balanço de massa em uma direção, por conveniência, a direção analisada será a direção  $z$ .

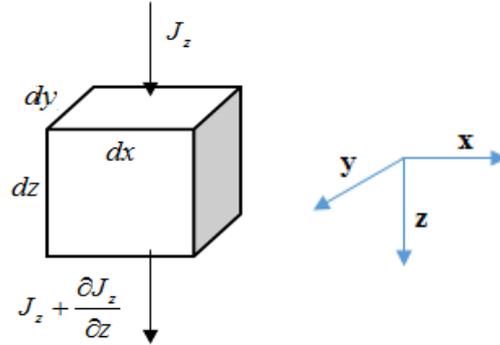


Figura 4.1 - Volume Elementar Representativo (VER).

Portanto, a equação de balanço de massa pode ser formulada de maneira geral considerando-se a acumulação ou depleção de um gás  $m$  em um volume de controle (VER) ao longo do tempo como resultado da divergência do fluxo (isto é, entrada ou saída líquida) e considerando as reações devido à oxidação do metano:

$$\frac{\partial [\theta_w c_w^m + \theta_a c_a^m]}{\partial t} = -\frac{\partial J_z}{\partial z} \pm \rho_d r_m \quad (4.13)$$

Por sua vez, o fluxo de um gás  $m$  na direção  $z$  é expressa pela soma do mecanismo advectivo da fase gasosa ( $J_{A,a}$ ) e líquida ( $J_{A,w}$ ), e do mecanismo da difusão molecular ( $J_D$ ) da fase gasosa:

$$J_z = J_{A,a} + J_{A,w} + J_D \quad (4.14)$$

Assim, pode-se descrever a variação da concentração molar de um gás  $m$ , demonstrado no Apêndice A, da seguinte forma (Molins e Mayer, 2007; Ng et al., 2015, Feng et al., 2017):

$$\frac{\partial [R_m \theta_a c_a^m]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} - \theta_a v_{r,za} c_a^m \right] - \frac{\partial}{\partial z} [\theta_w v_{r,zw} H^m c_a^m] \pm \rho_d r_m \quad (4.15)$$

onde,

$R_m$  = fator de retardamento do gás  $m$  [Adimensional].

#### 4.6 Coeficiente de difusão molecular de gases

No estudos dos gases, o mecanismo de difusão molecular é considerado preponderante sobre o mecanismo de dispersão mecânica. Dessa maneira, estudos extensos foram realizados (Cussler, 1984; Reid et al., 1987) para correlacionar o coeficiente de difusão de sistemas de gases binários ( $D_{ij}$ ). Nos estudos do  $D_{ij}$  em sistemas de baixa pressão, aquele que obteve a melhor comparação com dados experimentais, segundo Reid et al. (1987), foi a relação empírica sugerida por Fuller et al. (1966):

$$D_{ij} = \frac{143(T + 273.15)^{1.75}}{u_a M_{ij}^{1/2} \left[ (V_i)^{1/3} + (V_j)^{1/3} \right]^2} \quad (4.16)$$

$$M_{ij} = 2 \left[ \frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right]^{-1} \quad (4.17)$$

onde,

$T$  = temperatura do sistema [°C];

$V_i$  e  $V_j$  = volume de difusão atômico para cada componente ( $i$  e  $j$ ) [adimensional];

$M_i$  e  $M_j$  = massas molares dos gases  $i$  e  $j$  [g mol<sup>-1</sup>];

$u_a$  = pressão parcial ao qual o conjunto de gases está submetido [kPa].

Agora, quando o sistema é composto por multicomponentes o coeficiente de difusão pode ser obtido por meio de métodos empíricos considerando o conjunto dos componentes presentes. Uma maneira sugerida por Fairbanks e Wilke (1950) para a determinação do coeficiente de difusão ( $D_a^m$ ) de um componente  $m$  numa mistura de multicomponentes de um gás é:

$$D_a^m = \frac{(1 - X_m)}{\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^N \left( \frac{X_j}{D_{mj}} \right)} \quad (4.18)$$

onde,

$X_m$  e  $X_j$  = frações molares dos gases  $m$  e  $j$  [adimensional];

$D_{mj}$  = coeficiente de difusão de gases binários do componente  $m$  com todos os outros componentes  $j$  obtido pela Eq. (4.16);

$N$  = número de gases considerado na mistura de multicomponentes.

Na literatura é possível determinar os valores do volume de difusão atômico e massa molar de gases. Dessa forma, na Tabela 4.2 encontram-se valores dessas variáveis para alguns gases.

Tabela 4.2 - Propriedades químicas de gases para o cálculo do coeficiente de difusão molecular.

Gás	Massa Molar	Volume de Difusão
	(g mol <sup>-1</sup> )	Atômico
Metano (CH <sub>4</sub> )	16.04	25.14
Dióxido de carbono (CO <sub>2</sub> )	44.0	26.9
Oxigênio (O <sub>2</sub> )	31.99	16.3
Nitrogênio (N <sub>2</sub> )	18.01	18.5

O coeficiente de difusão molecular dado pela Eq. (4.18) representa a difusão molecular em uma seção não obstruída, ou seja, uma região livre de impedimento por qualquer alteração na seção transversal.

#### 4.7 Viscosidade dos gases

A viscosidade dos gases é uma propriedade física de simples entendimento quando

se analisa um sistema formado por somente um tipo de gás. Porém, quando se analisam problemas em que há vários gases, a contribuição da parcialização de cada gás deve ser verificada para que se tenha a viscosidade geral do sistema. Assim, segundo Reid et al. (1987), a viscosidade de uma mistura de gases ( $\mu_a$ ) pode ser obtida por:

$$\mu_a = \frac{\sum_{i=1}^N X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^N X_j \Phi_{ij}} \quad (4.19)$$

e

$$\Phi_{ij} = \frac{\left[ 1 + \left( \frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left( \frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{\sqrt{8 \left( 1 + \frac{M_i}{M_j} \right)}} \quad (4.20)$$

onde,

$\mu_i$  = viscosidade do gás  $i$  [kPa s];

$X_i$  e  $X_j$  = frações molares dos gases  $i$  e  $j$ , respectivamente [adimensional];

$M_i$  e  $M_j$  = massa molares dos gases  $i$  e  $j$ , respectivamente [g mol<sup>-1</sup>];

$N$  = número de gases considerado no sistema.

Além disso, cada gás individualmente sofre alterações devido a mudança de temperatura do sistema. Essa alteração pode ser atualizada pela formula empírica sugerida por Chung et al. (1988):

$$\mu_m = \left( 4.0785 \times 10^{-6} \right) \frac{\left[ M_m T \right]^{1/2}}{V_{cm}^{2/3} \Omega_m^*} F_c^m \quad (4.21)$$

e

$$F_c^m = 1 - 0.2756 \omega_m \quad (4.22)$$

onde,

$\mu_m$  = viscosidade do gás  $m$  [Pa s];

$M_m$  = massa molar do gás  $m$  [g mol<sup>-1</sup>];

$T$  = temperatura do sistema [K];

$V_{cm}$  = o volume crítico do gás  $m$  [cm<sup>3</sup> mol<sup>-1</sup>];

$\Omega_m^*$  = integral de colisão reduzida que depende do potencial intermolecular do gás  $m$  [adimensional];

$\omega_m$  = fator acêntrico do gás  $m$  [adimensional].

Neufeld et al. (1972) propuseram uma equação empírica para  $\Omega_m^*$  dada por:

$$\Omega_m^* = \left( \frac{A}{T_m^{*B}} \right) + \frac{C}{\exp(DT_m^*)} + \frac{E}{\exp(FT_m^*)} + GT_m^{*B} \sin(ST_m^{*W} - H) \quad (4.23)$$

e

$$T_m^* = 1,2593 \frac{T}{T_{cm}} \quad (4.24)$$

onde,

$T_{cm}$  = temperatura crítica do gás  $m$  [K]. Além disso,

$A = 1,16145$ ;  $B = 0,14874$ ;  $C = 0,52487$ ;  $D = 0,77320$ ;  $E = 2,16178$ ;  $F = 2,43787$ ;  $G = -6,435 \times 10^{-4}$ ;  $H = 7,27371$ ;  $S = 18,0323$ ;  $W = -0,7683$ . Todas essas variáveis são adimensionais.

Na Figura 4.2 encontram-se as viscosidades puras dos gases variando-se a temperatura com as considerações da Eq. (4.21). Na Figura 4.3 encontra-se a integral de colisão reduzida ( $\Omega_m^*$ ) dos mesmos gases segundo o proposto por Neufeld et al. (1972). Na Tabela 4.3, tem-se os valores de volume crítico e fator acêntrico dos gases metano, dióxido de carbono, oxigênio e nitrogênio.

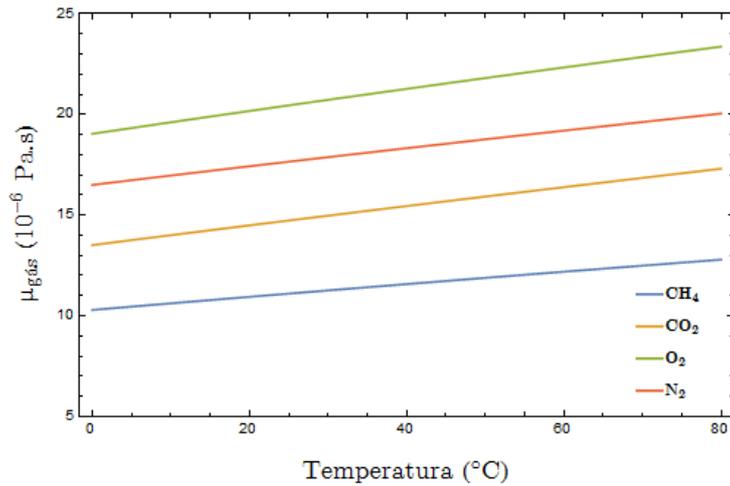


Figura 4.2 - Viscosidade de gás puro em diferentes temperaturas.

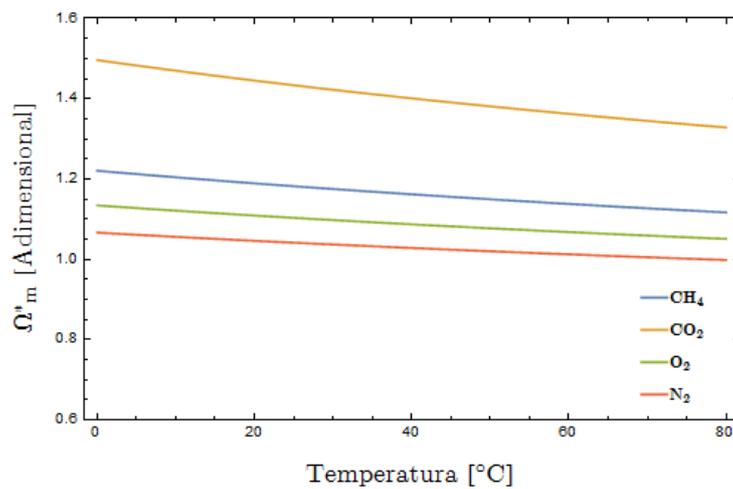


Figura 4.3 - Integral de colisão dos gases em diferentes temperaturas

Tabela 4.3 - Propriedades químicas de gases para o cálculo da viscosidade (Reid et al., 1987).

Gás	Volume crítico (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	Fator Acêntrico
Metano (CH <sub>4</sub> )	99.2	1.1 x 10 <sup>-2</sup>
Dióxido de carbono (CO <sub>2</sub> )	93.9	2.39 x 10 <sup>-1</sup>
Oxigênio (O <sub>2</sub> )	73.4	2.5 x 10 <sup>-2</sup>
Nitrogênio (N <sub>2</sub> )	89.8	3.9 x 10 <sup>-2</sup>

#### 4.8 Fluxo de gás através de uma seção

Além do cálculo de concentração de gases ao longo de uma posição e ao longo do

tempo, o conhecimento do fluxo também se torna necessário nos estudos de emissão para atmosfera. Portanto, o fluxo de um gás ( $J_m$ ) pode ser descrito tanto pela parcela difusiva (Lei de Fick) quanto pela parcela advectiva (Lei de Darcy) da forma (Xie et al., 2012):

$$J_m = -D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} + v_{za} c_a^m \quad (4.25)$$

$J_m$  = fluxo do gás  $m$  na posição  $z$  [ $\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ].

#### 4.9 Abordagens Numéricas e Analíticas para solução da ADE para gases

Nos estudos para o entendimento do transporte de gases em meio poroso não saturado, abordagens numéricas e analíticas foram desenvolvidas. Dessa forma, as Tabelas 4.4 e 4.5 mostram trabalhos realizados (numérico e analíticos, respectivamente) com o fluxo bifásico e também quais as principais relações constitutivas utilizadas para que se tenha uma adequada previsão do comportamento dos gases em um meio poroso não saturado.

Primeiramente, os trabalhos realizados com uma abordagem numérica possuem relações constitutivas da parcela advectiva dada somente pela Lei de Darcy (Metcalf e Farquhar, 1987; El-Fadel et al., 1989; Binning et al., 2007; Guan et al., 2016; Bian et al., 2018) ou a Lei de Darcy em paralelo com a de permeabilidade relativa (Molins e Mayer, 2007; Molins et al., 2008; Garg e Achari, 2010; Ng et al., 2015; Feng et al., 2017).

Quanto a parcela de dispersão hidrodinâmica, os métodos numéricos e analíticos desconsideram a parcela da dispersão mecânica. Assim, a difusão molecular, juntamente com a advecção, são os mecanismos de maior relevância considerados no transporte de

Tabela 4.4 - Métodos numéricos aplicados na previsão do transporte de gases em meio poroso

Autores	Método numérico utilizado	Abordagem	Umidade e Temperatura	Dimensões	Advecção	Dispersão Hidrodinâmica	Oxidação do metano		
					<i>Relação constitutiva</i>	<i>Viscosidade</i>	<i>Dispersão Mecânica</i>	<i>Difusão molecular</i>	
<b>Metcalf e Farquhar (1987)</b>	Código proposto por Frind (1982)	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e Temperatura constantes.	2D, transiente (x, z e t)	Lei de Darcy para gases. Desconsiderou permeabilidade relativa.	Proposta de Reid et al. (1987)	Proposta de Bear (1979)	Proposta de Bear (1979)	Não considerado
<b>El-Fadel et al. (1989)</b>	Diferença Finita	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Desconsiderou permeabilidade relativa e efeitos gravitacionais.	Proposta de Reid et al. (1987)	Não considerou	Proposta de Fairbanks e Wilke (1950)	Não considerado
<b>Molins e Mayer (2006)</b>	Modelo reativo de transporte MIN3P (Mayer et al., 2002)	Conservação de massa (Lei de Darcy e equações Stefan-Maxwell)	Umidade constante e Temperatura constante	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Considerou permeabilidade relativa e efeitos gravitacionais.	Proposta de Reid et al. (1987)	Não considerou	<i>Dusty Gas Model</i> (Mason e Malinauskas, 1983)	Não considerado

Tabela 4.4 - continuação

Autores	Método numérico utilizado	Abordagem	Umidade e Temperatura	Dimensões	Advecção	Dispersão Hidrodinâmica	Oxidação do metano		
<b>Binning et al. (2007)</b>	Solução de Elemento finito do software COMSOL Multiphysic 3.2.	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy) + equações de Stefan-Maxwell	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	<i>Relação constitutiva</i> Lei de Darcy para gases. Desconsiderou permeabilidade relativa.	<i>Viscosidade</i> Proposta de Reid et al. (1987)	<i>Dispersão Mecânica</i> Não considerou	<i>Difusão molecular</i> <i>Dusty Gas Model</i> (Mason e Malinauskas, 1983)	Proposta de De Visscher and Van Cleemput (2003)
	<b>Molins et al. (2008)</b>	Modelo reativo de transporte MIN3P (Mayer et al., 2002)	Equações de Stefan-Maxwell	Umidade constante e variável. Temperatura constante	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Considerou permeabilidade relativa e efeitos gravitacionais.	Proposta de Reid et al. (1987)	Não considerou	<i>Dusty Gas Model</i> (Mason e Malinauskas, 1983)
<b>Garg e Achari (2010)</b>		COMSOL Multiphysic 3.2	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e temperatura constantes e variáveis.	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Considerou permeabilidade relativa e efeitos gravitacionais.	Proposta de Reid et al. (1987)	Não considerou	Proposta de Fairbanks e Wilke (1950)

Tabela 4.4 - continuação

<b>Autores</b>	<b>Método numérico utilizado</b>	<b>Abordagem</b>	<b>Umidade e Temperatura</b>	<b>Dimensões</b>	<b>Advecção</b>		<b>Dispersão Hidrodinâmica</b>		<b>Oxidação do metano</b>
					<i>Relação constitutiva</i>	<i>Viscosidade</i>	<i>Dispersão Mecânica</i>	<i>Difusão molecular</i>	
<b>Ng et al. (2015)</b>	COMSOL Multiphysic (2013)	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e temperatura constantes e variáveis.	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Considerou permeabilidade relativa.	Proposta de Reid et al. (1987)	Não considerou	Proposta de Fairbanks e Wilke (1950)	Relação constitutiva de Abichou et al. (2011)
<b>Guan et al. (2016)</b>	COMSOL Multiphysic (2013)	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade constante e variável. Temperatura constante	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Desconsiderou permeabilidade relativa.	Constante	Não considerou	Relação linear com o teor de umidade volumétrico do gás	Não considerado
<b>Feng et al. (2017)</b>	COMSOL Multiphysic (2015)	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e temperatura constantes e variáveis.	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Considerou permeabilidade relativa.	Proposta de Reid et al. (1987)	Não considerou	Proposta de Fairbanks e Wilke (1950)	Relação constitutiva de Abichou et al. (2011)

Tabela 4.4 - continuação

Autores	Método numérico utilizado	Abordagem	Umidade e Temperatura	Dimensões	Advecção		Dispersão Hidrodinâmica		Oxidação do metano
		Conservação de massa			<i>Relação constitutiva</i>	<i>Viscosidade</i>	<i>Dispersão Mecânica</i>	<i>Difusão molecular</i>	
<b>Bian et al. (2018)</b>	COMSOL Multiphysic (2013)	(Lei de Darcy e equações Stefan-Maxwell)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	Lei de Darcy para gases. Desconsiderou permeabilidade relativa	Viscosidade dependente da temperatura	Não considerou	Equações de Stefan-Maxwell.	Relação constitutiva de Abichou et al. (2011)

Tabela 4.5 - Métodos analíticos aplicados na previsão do transporte de gases em meio poroso.

Autores	Abordagem	Umidade e Temperatura	Dimensões	Advecção		Dispersão Hidrodinâmica		Oxidação do metano
				<i>Relação constitutiva</i>	<i>Viscosidade</i>	<i>Dispersão Mecânica</i>	<i>Difusão molecular</i>	
<b>Jury et al. (1983)</b>	Conservação de massa (Lei de Fick)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	Considerado constante	-	-	Considerada Constante	Não considerado
<b>Lin e Hildemann (1995)</b>	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	Considerado constante	-	-	Considerada Constante	Não considerado

Tabela 4.5 - continuação

Autores	Abordagem	Umidade e Temperatura	Dimensões	Advecção		Dispersão Hidrodinâmica		Oxidação do metano
<b>William et al. (1999)</b>	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	<i>Relação constitutiva</i>	<i>Viscosidade</i>	<i>Dispersão Mecânica</i>	<i>Difusão molecular</i>	Termo de primeira ordem foi adicionado e ajustado ao modelo.
				Considerado constante	-	-	Considerada Constante	
<b>Yao et al. (2015)</b>	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, caso estacionário (z)	Considerado constante	-	-	Considerada Constante	Termo de primeira ordem constante foi adicionado ao modelo.
<b>Xie et al. (2016)</b>	Conservação de massa (Lei de Fick)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	Não considerado	-	-	Considerada Constante	Não considerado
<b>Wang et al. (2019)</b>	Conservação de massa (Lei de Fick e Darcy)	Umidade e Temperatura constantes.	1D, transiente (z e t)	Considerado constante	-	-	Considerada Constante	Termo de primeira ordem constante foi adicionado ao modelo.

gases. O coeficiente de difusão molecular é estimado por meio de duas abordagens principais: a primeira é a partir das considerações de Fairbanks e Wilke (1950), que estimam o coeficiente de difusão molecular de um gás em uma mistura de multicomponentes de gases, a segunda é por meio das equações Stefan-Maxwell (Krishna e Wesselingh, 1997), que segundo os autores é uma abordagem para descrever o transporte de massa que leva em consideração as não-idealidades termodinâmicas e a influência dos campos de força externos. Além disso, o *Dusty Gas Model* proposto por Mason e Malinauskas (1983) é uma adaptação das equações Stefan-Maxwell aplicada ao transporte de gases em aterros sanitários.

A oxidação do metano, que será discutida no capítulo 5, é um fenômeno que possui uma grande abundância de modelos. Contudo, no geral, todos são originados do modelo cinético de Monod. Embora os modelos tenham muitas semelhanças, a divergência encontra-se em considerar parâmetros que afetam a oxidação do metano (temperatura, umidade do solo e outros). Assim, De Visscher e Van Cleemput (2003) consideram o modelo cinético por meio da introdução de parâmetros estimados de dados experimentais. Já Abichou et al. (2011) introduziram os parâmetros modificadores de temperatura e umidade, uma vez que ambos os fatores modificam significativamente a oxidação do metano, além de considerar a teoria cinética de Michaelis-Menten.

A partir da Tabela 4.5 é possível verificar que os modelos analíticos possuem limitações quando comparados aos métodos numéricos. As principais simplificações dos métodos analíticos deve-se em considerar os termos advectivos e o coeficiente de difusão molecular como constantes e muito deles desconsiderar a oxidação do metano. Essas simplificações podem ocasionar erros significativos porque mudanças nas concentrações

dos gases ocasionam mudanças de viscosidade e, conseqüentemente, na velocidade, como também no coeficiente de difusão molecular. Além disso, ao não considerar a oxidação do metano pode-se prever concentrações maiores de metano uma vez que ele é consumido pelo oxigênio.

## 5. OXIDAÇÃO DO METANO

Nas células onde é disposto o RSU em aterros sanitários existem uma infinidade de processos e reações químicas ocorrendo devido aos diversos componentes que os formam. Assim, para um completo entendimento do processo de transporte de gases faz-se necessário compreender se essas substâncias são produzidas ou consumidas.

Uma reação química relevante para estudos de aterros sanitários é quanto à oxidação do metano. O processo de oxidação do metano reduz as emissões de metano e outros hidrocarbonetos voláteis da superfície de aterros (Scheutz et al., 2003). Os gases presentes em aterros sanitários são transportados através das camadas de cobertura dos aterros e devido ao contato com gases atmosféricos pode haver a oxidação pela presença do oxigênio (Kjeldsen et al., 1997).

### 5.1 Teoria Cinética de Michaelis-Menten

O modelo cinético de Michaelis-Menten é um modelo utilizado para explicar a taxa de reação de enzimas em qualquer processo químico da natureza. Assim, as reações químicas necessitam de uma descrição cinética de sua atividade. Para muitas reações, a taxa de catálise  $V_0$ , que é definida como o número de moles de produto formado por segundo, varia com a concentração do substrato  $[S]$  da maneira mostrada na Figura 5.1. A taxa de catálise aumenta linearmente à medida que a concentração de substrato aumenta e, em seguida, tende ao equilíbrio ao se aproximar de um máximo ( $V_{máx}$ ), sendo esse alcançado nos valores de concentrações de substrato mais altos (Berg et al., 2002).

O valor de  $V_{máx}$  (velocidade de reação máxima) corresponde à taxa de reação máxima em que ocorre a reação entre as substâncias e o substrato, tornando assim as

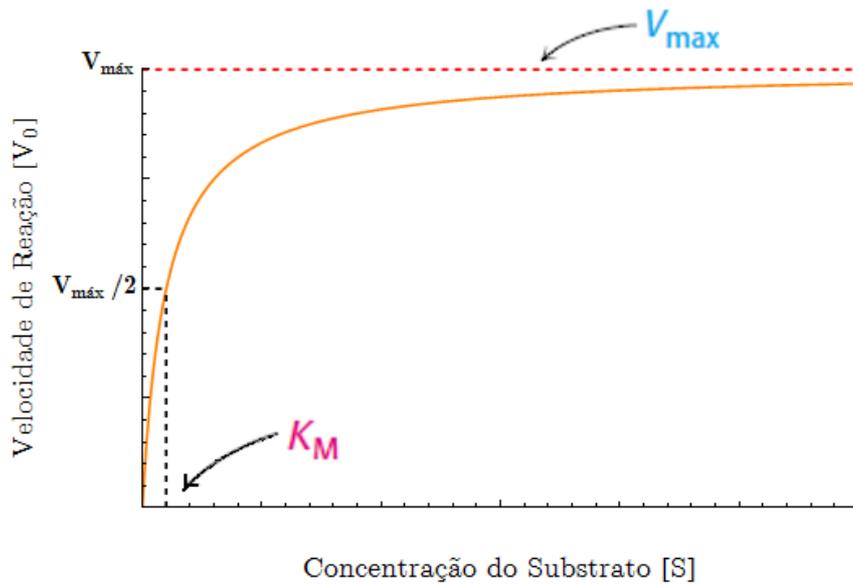


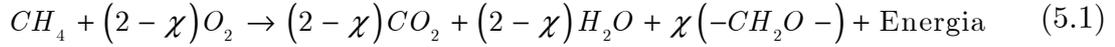
Figura 5.1 - Gráfico da velocidade de reação ( $V_0$ ) por concentração do substrato  $[S]$  que obedeça a cinética de Michaelis-Menten (Modificado de Berg et al., 2002).

substâncias saturadas com a quantidade de substrato disponível. A constante da taxa de meia saturação ( $K_M$ ) é uma característica importante das interações/reações do substrato e é independente das concentrações das reações (Berg et al., 2002). Em concentrações muito baixas de substrato, quando  $[S]$  é muito menor que  $K_M$ , a taxa é diretamente proporcional à concentração do substrato. Em altas concentrações de substrato, quando  $[S]$  é muito maior que  $K_M$  a taxa é máxima, independente da concentração do substrato. O significado de  $K_M$  é que quando  $[S] = K_M$ , então  $V_0 = V_{\max}/2$ . Assim,  $K_M$  é igual à concentração do substrato na qual a taxa de reação é metade do seu valor máximo (Berg et al., 2002).

## 5.2 Taxa de Oxidação do Metano ( $\text{CH}_4$ )

A oxidação é o processo químico que ocorre quando o metano ( $\text{CH}_4$ ) reage com oxigênio ( $\text{O}_2$ ) para produzir gás carbônico ( $\text{CO}_2$ ), água ( $\text{H}_2\text{O}$ ) e outras substâncias, liberando energia. Dessa forma, o metano em aterros sanitários pode ser reduzido entre

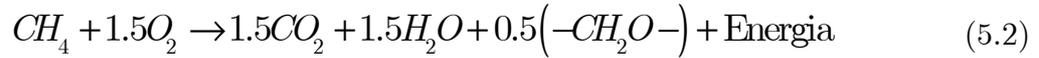
10 e 70% por meio da oxidação (Chanton et al., 2009; Scheutz et al., 2009). Segundo Chanton et al. (2009), a oxidação do metano pode ser descrita segundo a estequiometria:



onde,

$-CH_2O-$  = uma cadeia orgânica referente ao biomassa;

$\chi$  = coeficiente da estequiometria em que De Visscher e Van Cleemput (2003), propõem o valor de 0.5, tornando a Eq. (5.1) em:



Por outro lado, além do balanço estequiométrico, também é importante que se tenha a taxa de oxidação do metano ( $r_{CH_4}$ ), em que os gases são consumidos ou gerados, que é significativamente afetada pelo teor de umidade e temperatura do solo (Scheutz et al., 2009, Abichou et al., 2011). A partir da cinética de Michaelis-Menten é possível estimar  $r_{CH_4}$  com as seguintes recomendações de Abichou et al. (2011):

$$r_{CH_4} = -f_{V,T} f_{V,m} V_{\max} \frac{[CH_4]}{K_{CH_4} + [CH_4]} \times \frac{[O_2]}{K_{O_2} + [O_2]} \quad (5.3)$$

$$f_{V,T} = \begin{cases} 0.0142T; & T < 15^\circ C \\ 0.112T - 1.47; & 15^\circ C \leq T \leq 33^\circ C \\ 2.235 - 0.18(T - 33); & T > 33^\circ C \end{cases} \quad (5.4)$$

$$f_{V,m} = \begin{cases} 0; & \theta_w \leq \theta_{wilt} \\ \frac{\theta_w - \theta_{wilt}}{\theta_{fc} - \theta_{wilt}}; & \theta_{wilt} < \theta_w \leq \theta_{fc} \\ 1; & \theta_{fc} < \theta_w \leq \theta_s \end{cases} \quad (5.5)$$

onde,

$r_{CH_4}$  = taxa de oxidação de  $CH_4$  [ $mol\ kg^{-1}s^{-1}$ ];

$V_{máx}$  = taxa máxima de consumo de  $CH_4$  [ $mol\ kg^{-1}s^{-1}$ ];

$f_{V,T}$  e  $f_{V,m}$  = fator modificador em função da temperatura e umidade do solo, respectivamente [adimensional];

$K_{O_2}$  e  $K_{CH_4}$  = constantes da taxa de meia saturação de  $O_2$  e  $CH_4$  [Adimensional], respectivamente;

$[CH_4]$  e  $[O_2]$  = frações molares do metano e oxigênio [adimensional], respectivamente;

$\theta_{wilt}$  = teor de umidade volumétrica da água em que a atividade microbiana para a oxidação de metano é insignificante [ $m^3\ m^{-3}$ ];

$\theta_{fc}$  = capacidade de campo do solo, definida como teor de umidade volumétrica da água em que um solo pode reter água sem haver redistribuição de água para as camadas inferiores [ $m^3\ m^{-3}$ ].

Tanto os parâmetros  $K_{CH_4}$ ,  $K_{O_2}$  e  $V_{máx}$  são valores que são estimados em experimentos de incubação em laboratório. A vantagem do método proposto por Abichou et al. (2011) é que por meio dos ensaios de laboratório e determinação dos parâmetros necessários é possível corrigir o valor de  $r_{CH_4}$  para o valor de campo devido aos efeitos de temperatura e umidade por meio dos parâmetros  $f_{V,T}$  e  $f_{V,m}$ . (Figura 5.2)

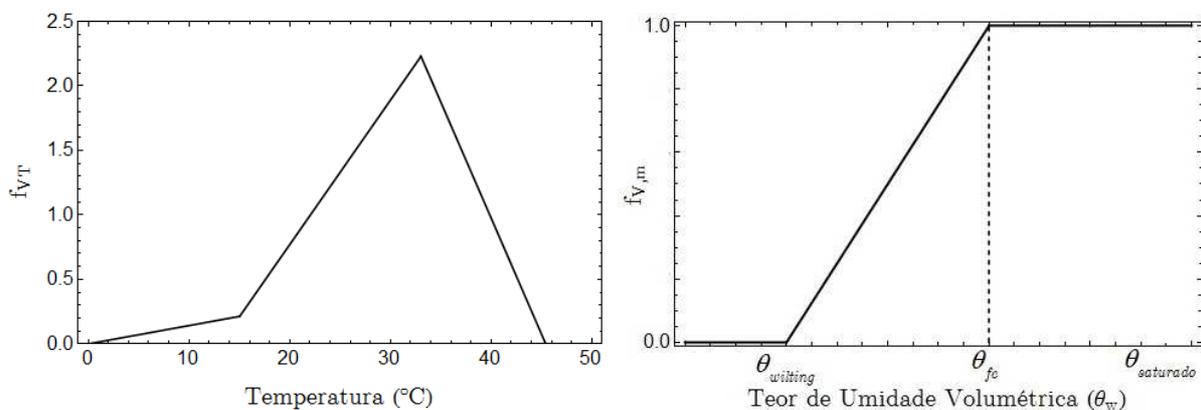


Figura 5.2 – fator modificado de temperatura e teor de umidade volumétrica

Além disso, devido ao balanço estequiométrico é possível determinar a taxa de oxidação das outras substâncias da reação química da oxidação. Dessa forma, segundo a Eq. (5.2), para a oxidação de 1 mol de  $\text{CH}_4$  são necessários 1.5 mol de  $\text{O}_2$  que após a reação química gera 0.5 mol de  $\text{CO}_2$  e 1.5 mol de  $\text{H}_2\text{O}$ , portanto:

$$r_{\text{O}_2} = 1.5r_{\text{CH}_4} \quad (5.6)$$

$$r_{\text{CO}_2} = -0.5r_{\text{CH}_4} \quad (5.7)$$

$$r_{\text{H}_2\text{O}} = -1.5r_{\text{CH}_4} \quad (5.8)$$

O sinal negativo indica que a substância está sendo produzida, isso porque a Eq. (5.3) já indica que a taxa de consumo de  $\text{CH}_4$  está consumindo-o e, por isso, também, há um sinal negativo. Portanto, faz-se necessário o sinal negativo para o  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  pois essas substâncias estão sendo geradas.

### 5.3 Eficiência da Oxidação do Metano

Além do conhecimento de haver a oxidação do metano por meio de reações químicas entre o metano e oxigênio, torna-se interessante também saber a eficiência de um solo quanto a remoção do metano. A eficiência da oxidação do metano ( $O_{ef}$ ) pode ser descrita de três formas possíveis (Feng et al., 2017), sendo a maneira convencional a mais utilizada para a análise. A maneira convencional baseia-se na diferença entre o fluxo introduzido ao sistema ( $J_{in}$ ) menos o fluxo de metano em uma certa seção ( $J_{out}$ ) em uma condição estacionária (Gebert et al., 2011; Roncato e Cabral, 2012; Pratt et al., 2013; Feng et al., 2017;):

$$O_{ef} = \frac{J_{in} - J_{out}}{J_{in}} \times 100 \quad (5.9)$$

onde,

$J_{in}$  = fluxo de metano introduzido ao sistema [ $\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ];

$J_{out}$  = fluxo de metano em uma certa posição no solo de cobertura [ $\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ].

Desta forma, pode-se determinar qual o fluxo de metano oxidado ( $J_{ox}$ ) em uma certa posição do solo de cobertura:

$$J_{ox} = J_{in} - J_{out} \quad (5.10)$$

Podem-se realizar certas análises tanto ao longo da profundidade da cobertura, quanto no topo na cobertura para quantificar a eficiência da oxidação do metano.

## 6. METODOLOGIA

### 6.1 Material

O material utilizado para validação do modelo refere-se ao ensaio laboratorial realizado por De Visscher et al. (1999). O experimento realizado (Figura 6.1) constituiu-se em uma coluna de acrílico com altura de 0.6 m e diâmetro interno de 0.141 m colocada sobre uma placa de PVC perfurada. A parte superior deste cilindro de 60 cm foi fechada por outra placa de PVC. Abaixo da placa perfurada de PVC, CH<sub>4</sub> e CO<sub>2</sub> foram bombeados em um cilindro pequeno de acrílico (altura de 6 cm, diâmetro interno de 14.1 cm) no mesmo fluxo de 13.4 mol m<sup>-2</sup>dia<sup>-1</sup>. O fluxo de gás foi controlado com uma válvula de agulha e medida com um medidor de fluxo (*soap film flow meter*). Para garantir o fluxo de entrada foi necessário uma vazão de 7 mL min<sup>-1</sup>.

O fundo do pequeno cilindro foi fechado por uma placa de PVC e foi adicionado uma porta de amostra para bombeamento do gás afluente. O cilindro de 0.6 m foi preenchido até uma altura de 0.5 m de areia siltosa, deixando 0.1 m de espaço na parte superior. A parte superior do cilindro foi continuamente bombeada com ar, umedecido com o uso de uma garrafa de água para evitar a desidratação da superfície do solo. As portas de amostragem de gás foram colocadas a cada 0.1 m ao longo da coluna. O teste foi realizado em temperatura ambiente de 22 ° C.

As amostras do gás efluente, que foram de 100 μL, foram retiradas de 2 a 4 vezes por semana na porta de amostragem do efluente e a análise do CH<sub>4</sub> foi realizada com o aparelho *Chrompack 9000 CC*. Por haver as informações do gás afluente e efluente foi possível realizar o cálculo de eficiência da oxidação do CH<sub>4</sub> com o balanço de massa.

Quanto as portas de amostragem ao longo da coluna, amostras de 500  $\mu\text{L}$  ou 1000  $\mu\text{L}$  foram retiradas e analisadas para os gases  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$ .

O solo utilizado no ensaio de coluna e analisado nessa pesquisa é um solo agrícola que foi retirado de uma plantação de milho na *Melle Experimental University Farm* (Bélgica). A composição granulométrica era de 49,8% areia, 40,4% silte e 9,8% de argila. Os dados relativos ao solo encontra-se na Tabela 6.1.

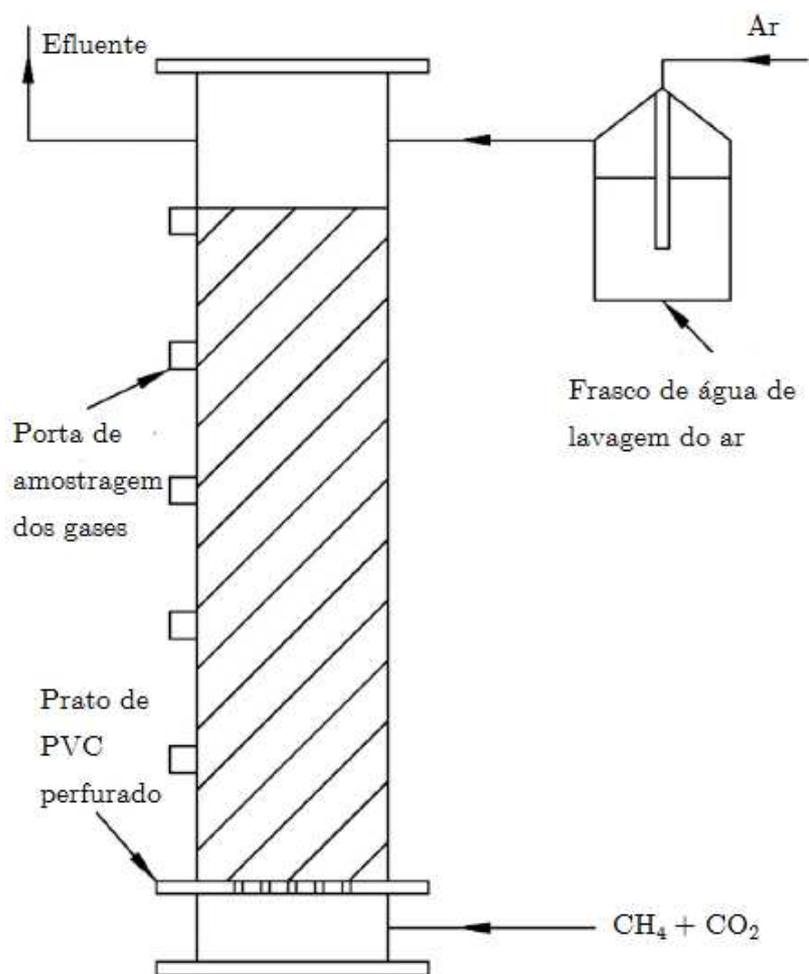


Figura 6.1 - Experimento Laboratorial de coluna em amostra de solo simulando a oxidação do metano (modificado de Ng et al., 2015).

Na Figura 6.2 encontra-se o perfil da fração molar no 28<sup>o</sup> dia e na Figura 6.3 encontra-se a taxa de  $\text{CH}_4$  oxidada durante o ensaio até o 28<sup>o</sup> dia.

Tabela 6.1 - Parâmetros do solo agrícola utilizado no ensaio de De Visscher et al. (1999)

Parâmetro	Valor	Unidade
Porosidade ( $n$ )	0.587	-
Massa específica seca do solo ( $\rho_d$ )	1039	kg m <sup>-3</sup>
Massa específica das partículas ( $\rho_s$ )	2521	kg m <sup>-3</sup>
Teor de umidade volumétrica saturado ( $\theta_s$ )	0.587	-
Teor de umidade volumétrica residual ( $\theta_r$ )	2 x 10 <sup>-2</sup>	-
Taxa de oxidação máxima do metano ( $V_{máx}$ )	7.5 x 10 <sup>-5</sup>	mol kg <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
$K_{O_2}$	1.2 x 10 <sup>-2</sup>	-
$K_{CH_4}$	6.6 x 10 <sup>-3</sup>	-
Permeabilidade intrínseca (K)	5.8 x 10 <sup>-12</sup>	m <sup>2</sup>

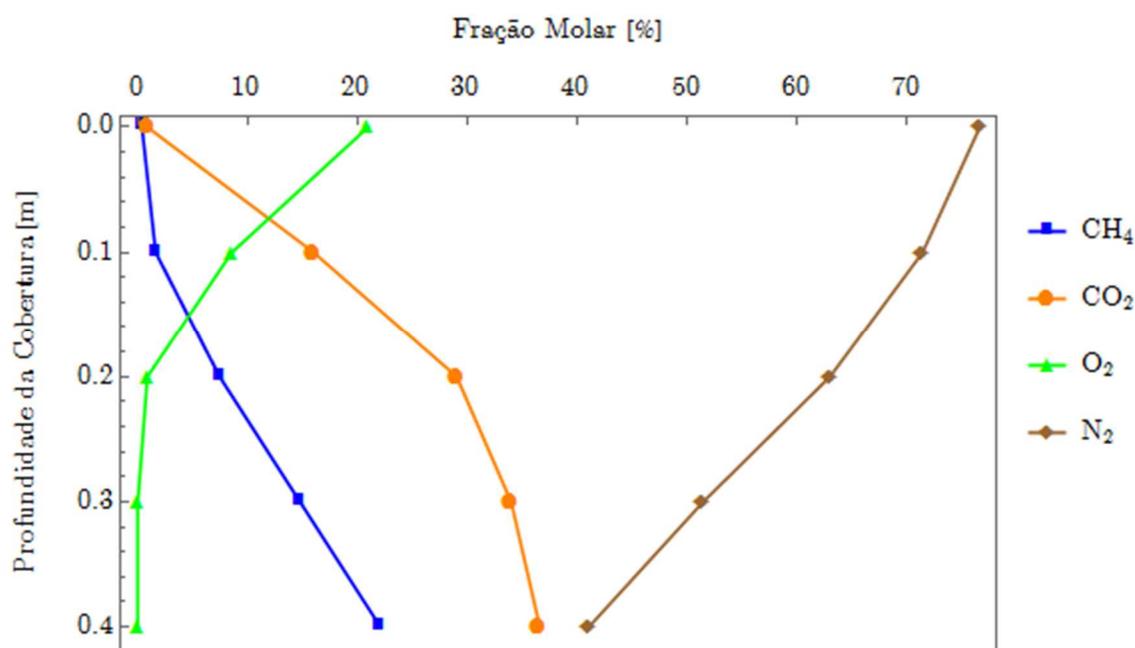


Figura 6.2 - Fração molar dos gases no 28<sup>o</sup> dia de experimento (De Visscher et al., 1999).

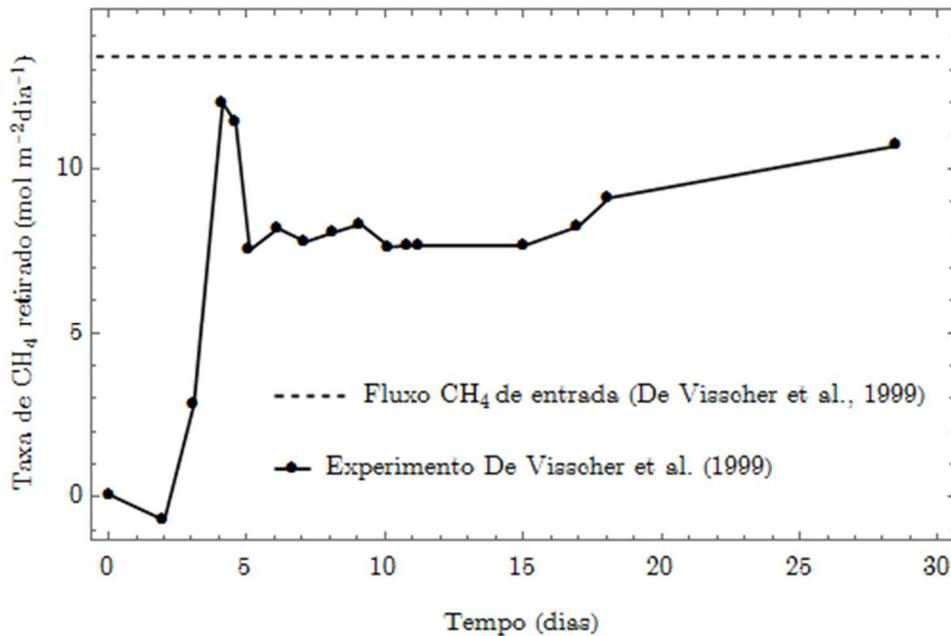


Figura 6.3 – Taxa de metano ( $\text{CH}_4$ ) retirado/oxidado durante a realização do experimento (De Visscher et al., 1999).

## 6.2 Métodos

### 6.2.1 Relações Constitutivas para a Equação Advecção-Dispersão (ADE) para gases

A metodologia utilizada nesse trabalho encontra-se na Figura 6.4. Assim, para que se resolva a equação de transporte de gases é necessário utilizar relações constitutivas para as velocidades das fases líquidas e gasosas, coeficiente de difusão molecular, viscosidade dos gases e quanto a oxidação do metano. Primeiramente, a metodologia consiste em simplificar a equação da advecção-dispersão (ADE) para gases (Eq. 4.15) para que seja compatível com a ADE clássica onde haja geração/consumo dos gases, que possui soluções analíticas para diferentes condições de contorno.

Portanto, o transporte advectivo, tanto da fase gasosa, quanto da fase líquida será descrito segundo a Lei de Darcy. A lei de Darcy para gases (Eq. 4.2) será utilizada desprezando-se os efeitos gravitacionais em gases. Além disso, a velocidade de infiltração será considerado nulo ( $v_{r,zw} = 0$ ) uma vez que durante a realização do

experimento realizado por De Visscher et al. (1999) não houve a formação de gradientes hidráulicos. Quanto aos gases solubilizados na fase líquida, a lei de Henry (Eq. 4.9) será usada para relacionar com os gases da fase gasosa.

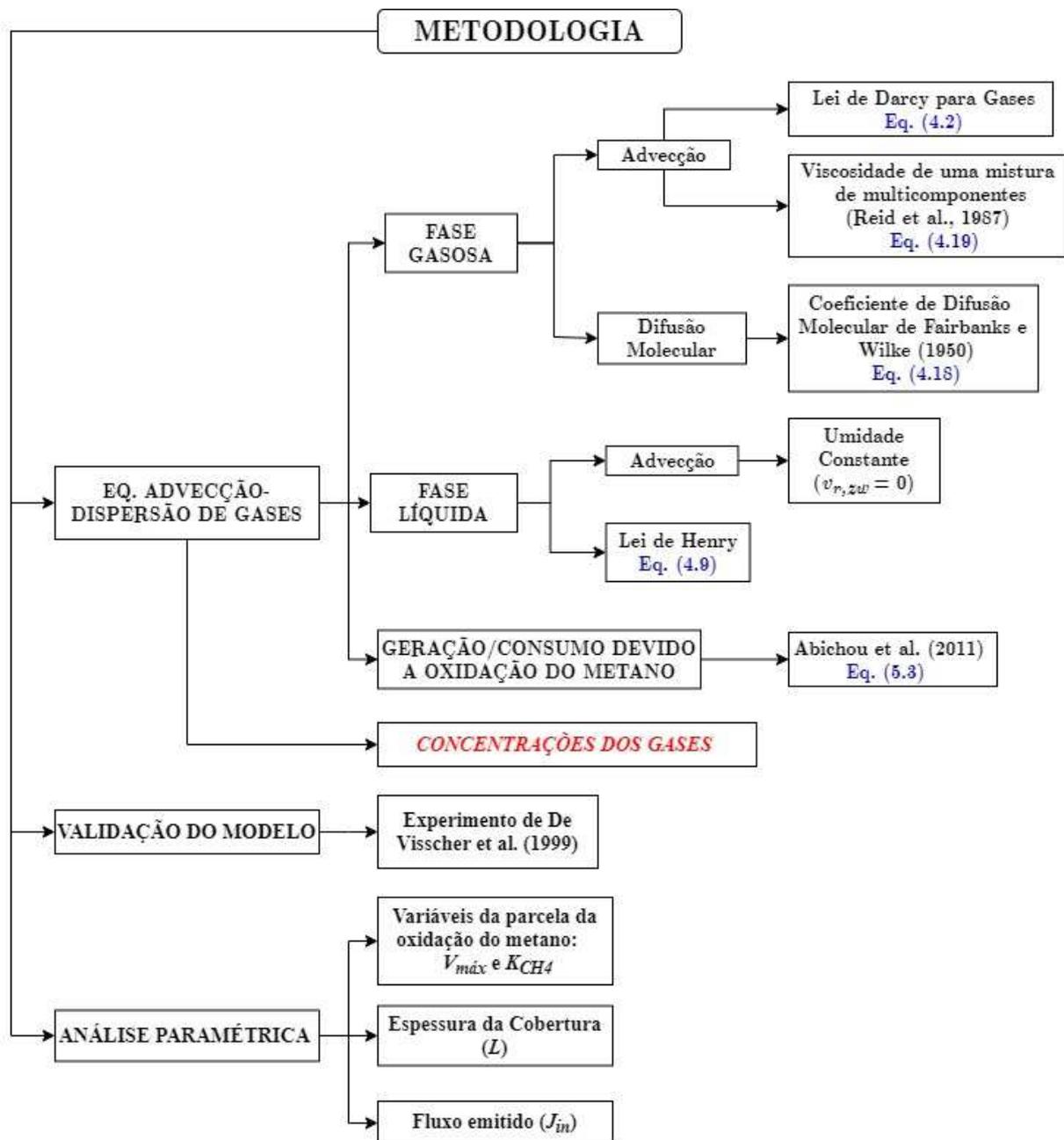


Figura 6.4 - Metodologia utilizada na pesquisa

O coeficiente de difusão molecular será calculado utilizando a relação empírica da difusão de multicomponentes sugerido por Fairbanks e Wilke (1950) (Eq. 4.18). A viscosidade dos gases puros será descrita pelo proposto por Chung et al. (1988) (Eq.

4.21), e para a mistura de multicomponente será utilizado o método proposto por Reid et al. (1987) (Eq. 4.19).

A parcela de geração/consumo de substâncias devido a oxidação do metano será considerada pelo proposto por Abichou et al. (2011) (Eq. 5.3). Esse é derivado da teoria cinética de Michaelis-Mentes e depende da fração molar dos gases, temperatura e teor de umidade volumétrica da água.

Por fim, haverá validação do modelo por meio do experimento realizado por De Visscher et al. (1999). Além disso, uma análise paramétrica será realizada para o entendimento dos efeitos dos valores da influência da taxa máxima de consumo de  $\text{CH}_4$  ( $V_{m\acute{a}x}$ ), da taxa de meia saturação do  $\text{CH}_4$  ( $K_{\text{CH}_4}$ ), espessura da cobertura ( $L$ ) e do fluxo emitido/gerado da fonte do biogás ( $J_{in}$ ). Dessa forma, a solução das equações de concentração dos gases, validação, análise paramétrica serão realizadas com auxílio do *Software Wolfram Mathematica 12* (Wolfram Research, 2019).

Além disso, os gases escolhidos para a simulação do transporte serão os mais significativos na concentração do biogás, conseqüentemente, os mais utilizados em ensaios de laboratório em coluna. Os gases que serão analisados serão o metano ( $\text{CH}_4$ ), dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), oxigênio ( $\text{O}_2$ ) e nitrogênio ( $\text{N}_2$ ).

De forma geral, as considerações realizadas nessa pesquisa constam em: solo não saturado composto de um meio trifásico (líquido, gás e partículas sólidas); fase líquida composta por água; fase gasosa composta por uma mistura de 4 gases ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ) e todos os gases considerados como ideais; partículas sólidas consideradas rígidas; porosidade, umidade e temperatura constantes; desconsideração da geração de água devido a oxidação do metano; efeito gravitacional nulo nos gases.

## 7. DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO

Um nova abordagem de solução analítica transiente para a equação de transporte de gases que considera a oxidação do metano foi desenvolvida. O desenvolvimento matemático para simplificação da equação encontra-se descrito nesse capítulo. Encontra-se também as condições iniciais e de contorno utilizadas para solução da ADE proposta.

### 7.1 Manipulação matemática para simplificação da ADE para gases

No capítulo 4 foi mostrado como a equação advecção-dispersão pode ser e vem sendo utilizada para cálculos do transporte de massa de gases. Contudo, devido à alta não-linearidade, o tratamento da equação por soluções analíticas torna-se não triviais. Dessa forma, para que seja possível a utilização de uma abordagem analítica a equação necessita de manipulações para simplificação da sua complexidade. Portanto, considerando a ADE para gases e as considerações descritas no Apêndice B, tem-se que a Eq. 4.15, pode ser reescrita da forma:

$$R_m \frac{\partial c_a^m}{\partial t} = D_a^{m,ef} \frac{\partial^2 c_a^m}{\partial z^2} - \left[ v_{r,za} + \frac{(\theta_s - \theta_a)}{\theta_a} v_{r,zw} H^m \right] \frac{\partial c_a^m}{\partial z} \pm \gamma^m \quad (7.1)$$

O grande problema dessa equação deve-se a velocidade de percolação dos gases ( $v_{r,za}$ ) por não possuir relações constitutivas que simplifiquem o problema. Assim, para que haja essa simplificação invoca-se a definição de sucção total (Eq. 3.6) e a definição de  $v_{r,za}$  (Eq. 7.3):

$$\psi = (u_a - u_w) + \pi \quad (7.2)$$

e

$$v_{r,za} = -\frac{K}{\theta_a \mu_a} \frac{\partial u_a}{\partial z} \quad (7.3)$$

Utilizando a Eq. (7.2) e isolando a pressão de ar no poro ( $u_a$ ) e substituindo na Eq. (7.3) tem-se:

$$v_{r,za} = -\frac{K}{\theta_a \mu_a} \left[ \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{\partial u_w}{\partial z} - \frac{\partial \pi}{\partial z} \right] \quad (7.4)$$

Considerando a sucção osmótica ( $\pi$ ) como constante ao longo da profundidade ( $\partial \pi / \partial z = 0$ ) e isolando a Eq. (7.4) em relação ao gradiente da sucção, tem-se:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = - \left[ \frac{\mu_a \theta_a v_{r,za}}{K} + \frac{\partial u_w}{\partial z} \right] \quad (7.5)$$

onde, considerando a variação da poropressão conforme descrito pela Eq. (3.9):

$$\frac{\partial u_w}{\partial z} = \frac{1}{\frac{\partial \theta_w}{\partial \psi}} \frac{\partial \theta_w}{\partial z} \quad (7.6)$$

A derivada  $\frac{\partial \theta_w}{\partial \psi}$  pode ser obtida por meio de relações constitutivas para obtenção da curva de retenção e  $\frac{\partial \theta_w}{\partial z}$  obtém-se por meio de soluções analíticas do teor de umidade volumétrica da água. Ambos os casos foram propostos por Cavalcante e Zornberg (2017) e considerando suas hipóteses tem-se:

$$\frac{\partial u_w}{\partial z} = d_{cz}(z, t) \quad (7.7)$$

onde,

$d_{cz}(z, t)$  = variável que depende da posição ( $z$ ) e tempo ( $t$ ) que é descrita por:

$$d_{cz}(z, t) = \frac{1}{-\delta(\theta_s - \theta_r) \exp(-\delta|\psi|)} \frac{\partial}{\partial z} [\theta_w(z, t)] \quad (7.8)$$

onde,

$\delta$  = parâmetro de ajuste hidráulico de Cavalcante e Zornberg (2017) [kPa].

Assim, a Eq. (7.5) torna-se:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = - \left[ \frac{\mu_a \theta_a v_{r,za}}{K} + d_{cz} \right] \quad (7.9)$$

A outra simplificação requerida neste trabalho é a obtenção da velocidade real de percolação de gases em relação a velocidade de percolação da água ( $v_{r,zw}$ ), portanto invocando-se a lei de Darcy-Buckinham (Eq. 3.10) e isolando em termos do gradiente da sucção obtém-se:

$$v_{r,zw} = - \frac{k_{zw}(\psi)}{\theta_w \rho_w g} \frac{\partial}{\partial z} (\psi - \rho_w g z) \quad (7.10)$$

e

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = - \left( \frac{v_{r,zw} \theta_w \rho_w g}{k_{zw}(\psi)} \right) + \rho_w g \quad (7.11)$$

Igualando-se as Eqs. (7.9) e (7.11) e isolando em termos de  $v_{r,za}$  encontra-se:

$$v_{r,za} = \frac{K}{\theta_a \mu_a} \left[ (\theta_s - \theta_a) \left( \frac{v_{r,zw} \rho_w g}{k_{zw}(\theta_w)} \right) - d_{cz} - \rho_w g \right] \quad (7.12)$$

Importante salientar que durante um processo de infiltração os valores de  $v_{r,zw}$ ,  $k_{zw}(\theta_w)$  e  $d_{cz}$  variam tanto com a profundidade quanto com o tempo. Em sistemas em que a umidade seja constante e não exista o processo de infiltração, portanto, não existirá a variação de  $\theta_w$ . Dessa forma, a  $v_{r,zw}$  torna-se nula por não haver infiltração e, conseqüentemente, a água não infiltrará pela ausência de gradientes hidráulicos. De forma semelhante,  $d_{cz}$  torna-se nulo por  $\theta_w$  não variar ( $\frac{\partial \theta_w(z,t)}{\partial z} = 0$ ). Embora ambos os

valores sejam nulos ( $v_{r,zw}$  e  $d_{cz}$ ), o valor  $k_{zw}(\theta_w)$  é constante pois esse valor depende do valor de  $\theta_w$  que em ausência de infiltração é constante.

Portanto, substituindo-se a Eq. (7.12) na Eq. (7.1) tem-se:

$$R_m \frac{\partial c_a^m}{\partial t} = D_a^{m,ef} \frac{\partial^2 c_a^m}{\partial z^2} - v_{eq}^m \frac{\partial c_a^m}{\partial z} \pm \gamma^m \quad (7.13)$$

$v_{eq}^m$  = velocidade equivalente do gás  $m$  no novo modelo proposto [ $m \text{ s}^{-1}$ ] obtido por:

$$v_{eq}^m = \frac{K}{\theta_a \mu_a} \left[ (\theta_s - \theta_a) \left( \frac{v_{r,zw} \rho_w g}{k_{zw}(\theta_w)} - d_{cz} - \rho_w g \right) + \frac{(\theta_s - \theta_a)}{\theta_a} v_{r,zw} H^m \right] \quad (7.14)$$

### 7.1.1 Equação Advecção-Dispersão para gases simplificada

Um dos objetivos da pesquisa é resolver analiticamente a equação advecção-dispersão (ADE) para gases sem a necessidade de haver grandes simplificações. Portanto, as equações abaixo demonstram como a ADE para gases será trabalhada e resolvida por meio de soluções de contorno específicas. Assim, a ADE para os gás metano ( $\text{CH}_4$ ) será descrita da forma:

$$R_{CH_4} \frac{\partial c_a^{CH_4}}{\partial t} = D_a^{CH_4,ef} \frac{\partial^2 c_a^{CH_4}}{\partial z^2} - v_{eq}^{CH_4} \frac{\partial c_a^{CH_4}}{\partial z} - \gamma^{CH_4} \quad (7.15)$$

onde

$$R_{CH_4} = 1 + \frac{\theta_w H^{CH_4}}{\theta_a} \quad (7.16)$$

A ADE para os gás dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) será descrita da forma:

$$R_{CO_2} \frac{\partial c_a^{CO_2}}{\partial t} = D_a^{CO_2,ef} \frac{\partial^2 c_a^{CO_2}}{\partial z^2} - v_{eq}^{CO_2} \frac{\partial c_a^{CO_2}}{\partial z} + \gamma^{CO_2} \quad (7.17)$$

onde

$$R_{CO_2} = 1 + \frac{\theta_w H^{CO_2}}{\theta_a} \quad (7.18)$$

A ADE para os gás oxigênio ( $O_2$ ) será descrita da forma:

$$R_{O_2} \frac{\partial c_a^{O_2}}{\partial t} = D_a^{O_2,ef} \frac{\partial^2 c_a^{O_2}}{\partial z^2} - v_{eq}^{O_2} \frac{\partial c_a^{O_2}}{\partial z} - \gamma^{O_2} \quad (7.19)$$

onde

$$R_{O_2} = 1 + \frac{\theta_w H^{O_2}}{\theta_a} \quad (7.20)$$

A ADE para os gás nitrogênio ( $N_2$ ) será descrita da forma:

$$R_{N_2} \frac{\partial c_a^{N_2}}{\partial t} = D_a^{N_2,ef} \frac{\partial^2 c_a^{N_2}}{\partial z^2} - v_{eq}^{N_2} \frac{\partial c_a^{N_2}}{\partial z} \quad (7.21)$$

onde

$$R_{N_2} = 1 + \frac{\theta_w H^{N_2}}{\theta_a} \quad (7.22)$$

As equações acima são ADEs que possuem um termo de ordem zero que nessa pesquisa está relacionada à oxidação do metano. A seguir são descritas a solução analítica utilizada nessa pesquisa e as condições de contorno e iniciais para a solução da equações de transporte de gases considerada nessa pesquisa.

### ***7.1.2 Solução Analítica da ADE para gases simplificada***

A equação (7.13) é de grande importância para o estudo do transporte de gases e entendimento do fenômeno como um todo. Dessa forma, suas soluções constam em diversos trabalhos da literatura (Van Genuchten, 1980; Van Genuchten e Alves, 1982). Ao longo dessa pesquisa a solução dessa equação será de suma importância e, por isso, uma das suas soluções, com condições iniciais e de contorno específicas, será aqui trabalhada.

Portanto, segundo Van Genuchten e Alves (1982), caso a Eq. (7.13) possua como condição inicial uma concentração do gás  $m$  ( $c_i^m$ ) ao longo de todo um perfil tem-se que:

$$c_a^m(z, 0) = c_i^m \quad (7.23)$$

Além disso, caso tenha-se como condição de contorno na no topo da coluna ( $z=0$ ) uma concentração *do gás*  $m$  ( $c_0^m$ ) imposta, então:

$$c_a^m(0, t) = c_0^m \quad (7.24)$$

Por fim, caso na fronteira inferior ( $z=L$ ) tenha-se que o gradiente da concentração seja nulo, então:

$$\frac{\partial c_a^m}{\partial z}(L, t) = 0 \quad (7.25)$$

Essa condição de contorno implica que, ao longo da profundidade, a concentração do contaminante tende a um valor constante.

Assim, a Eq. (7.13) tem como solução analítica devido as condições iniciais e de contorno mencionadas:

$$c_a^m(z, t) = c_i^m + (c_0^m - c_i^m)A(z, t) + B(z, t) \quad (7.26)$$

onde as equações auxiliares são expressas por:

$$\begin{aligned} A(z, t) = & \frac{1}{2} \operatorname{erfc}[Z_-] + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{v_{eq}^m z}{D_a^{m,ef}}\right) \operatorname{erfc}[Z_+] \\ & + \frac{1}{2} \left[ 2 + \frac{v_{eq}^m (2L - z)}{D_a^{m,ef}} + \frac{(v_{eq}^m)^2 t}{D_a^{m,ef} R_m} \right] \exp\left(\frac{v_{eq}^m L}{D_a^{m,ef}}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{R_m (2L - z) - v_{eq}^m t}{2(D_a^{m,ef} R_m t)^{1/2}}\right] \\ & - \left(\frac{(v_{eq}^m)^2 t}{\pi D_a^{m,ef} R_m}\right) \exp\left[\frac{v_{eq}^m L}{D_a^{m,ef}} - \frac{R_m}{4D_a^{m,ef} t} \left(2L - z + \frac{v_{eq}^m t}{R_m}\right)^2\right] \end{aligned} \quad (7.27)$$

$$\begin{aligned}
B(z,t) = & \frac{\gamma^m}{R_m} \left\{ t + \frac{(R_m z - v_{eq}^m t)}{2v_{eq}^m} \operatorname{erfc}[Z_-] - \frac{(R_m z + v_{eq}^m t)}{2v_{eq}^m} \exp\left(\frac{v_{eq}^m L}{D_a^{m,ef}}\right) \operatorname{erfc}[Z_+] \right. \\
& + \left. \left( \frac{t}{4\pi D_a^{m,ef} R_m} \right) \left[ R_m (2L - z) + v_{eq}^m t + \frac{2D_a^{m,ef} R_m}{v_{eq}^m} \right] \times \right. \\
& \times \exp \left[ \frac{v_{eq}^m L}{D_a^{m,ef}} - \frac{R_m}{4D_a^{m,ef} t} \left( 2L - z + \frac{v_{eq}^m t}{R_m} \right)^2 \right] \\
& - \left[ t + \frac{v_{eq}^m R_m (2L - z) - D_a^{m,ef} R_m}{2(v_{eq}^m)^2} + \frac{R_m}{4D_a^{m,ef}} \left( 2L - z + \frac{v_{eq}^m t}{R_m} \right)^2 \right] \\
& \times \exp \left( \frac{v_{eq}^m L}{D_a^{m,ef}} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{R_m (2L - z) - v_{eq}^m t}{2(D_a^{m,ef} R_m t)^{1/2}} \right] \\
& \left. - \frac{D_a^{m,ef} R_m}{2(v_{eq}^m)^2} \exp \left( \frac{v_{eq}^m (z - L)}{D_a^{m,ef}} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{R_m (2L - z) - v_{eq}^m t}{2(D_a^{m,ef} R_m t)^{1/2}} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{7.28}$$

e

$$Z_{\pm} = \frac{R_m z \pm v_{eq}^m t}{2(D_a^{m,ef} R_m t)^{1/2}} \tag{7.29}$$

Interessante notar que a equação auxiliar  $B(z,t)$  torna-se nula para casos onde não ocorra geração ou consumo do  $m$  (caso do nitrogênio,  $N_2$ ), ou seja, o termo  $\gamma^m$  seria nulo, tornando todo o termo expresso pela Eq. (7.28) nulo.

## 7.2 Condições de Contorno

Primeiramente, foram utilizadas as concentrações dos gases ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$ ) encontrados na atmosfera como condições iniciais das ADEs. Dessa forma, a concentração dos mesmos na atmosfera são  $c_i^{CH_4} = 0 \text{ mol m}^{-3}$ ;  $c_i^{CO_2} = 0.011 \text{ mol m}^{-3}$ ;  $c_i^{O_2} = 9.33 \text{ mol m}^{-3}$ ;  $c_i^{N_2} = 31.72 \text{ mol m}^{-3}$  (Ng et al., 2015).

As condições de contorno utilizadas para as equações de transporte dos gases serão semelhantes e correspondentes às Eqs.(7.24) e (7.25). Porém, devido ao fenômeno de transporte dos gases  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$  ocorrer de baixo para cima (concentração imposta na parte inferior da coluna), as fronteiras superiores e inferiores dos gases  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$  serão diferentes do  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$ . Apesar das posições das fronteiras serem diferentes nos diferentes casos, tomou-se o cuidado para que a posição global superior fosse adotada como  $z = 0$  e a posição global inferior adotada como  $z = L$ . Sendo  $z = 0$  o topo da camada de cobertura do aterro sanitário exposta à atmosfera (atm) e  $L$  a espessura da camada de cobertura analisada (Figura 7.1).

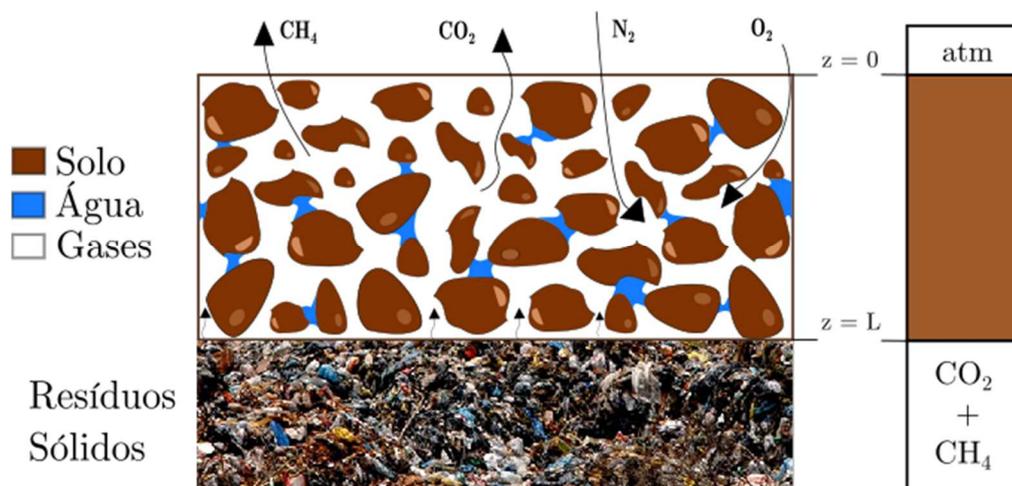


Figura 7.1 - Posições globais utilizada nas soluções analíticas das equações de transporte.

Primeiramente, para os gases  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$  (biogás) foram utilizado as posições locais  $Z_{\text{biogás}} = 0$  para a posição onde o gás está sendo injetado/produzido e  $Z_{\text{biogás}} = L$ , a posição do topo da camada de cobertura exposta à atmosfera, conforme a Figura 7.2. A necessidade de posições locais deve-se às condições de contorno da solução analítica. Portanto, na posição da fonte produtora ( $Z_{\text{biogás}} = 0$ ) é imposto as concentrações do gases ( $c_0^{\text{CH}_4}$  e  $c_0^{\text{CO}_2}$ ) presentes no biogás. Assim, devido à falta de compatibilidade entre

posição local e global realizou-se nessa pesquisa todas as modificações necessárias para se trabalhar somente com a posição global.

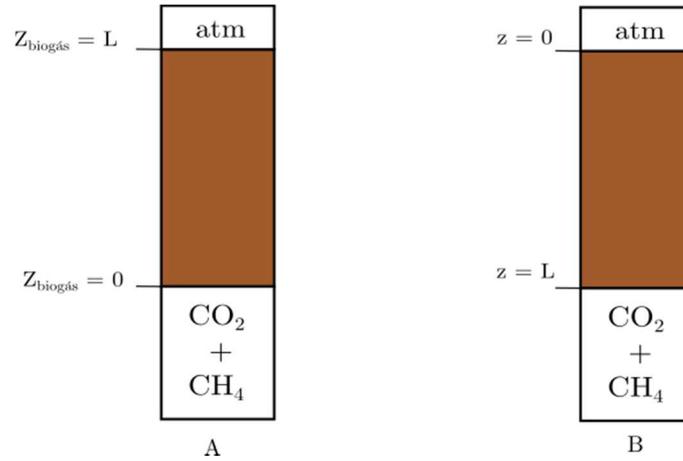


Figura 7.2 - Posição local das condições de contorno da solução analítica (A) e posição global utilizada e adaptada à solução analítica (B).

Posteriormente, o desafio de validar ensaios realizados com gases presentes no biogás deve-se aos dados fornecidos pelos autores que contemplam somente o fluxo de entrada dos gases ( $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$ ). Dessa forma, necessita-se uma conversão dos valores de fluxo para os valores de concentração dos gases na base da cobertura (posição onde biogás é injetado). A forma utilizada para conversão baseia-se no seguinte cálculo:

$$c_0^{CH_4, CO_2} = \frac{J_{in} A_{col.}}{Q} \quad (7.30)$$

onde,

$c_0^{CH_4, CO_2}$  = concentração do  $\text{CH}_4$  ou  $\text{CO}_2$  [ $\text{mol m}^{-3}$ ];

$J_{in}$  = fluxo de entrada no ensaio [ $\text{mol m}^{-2} \text{dia}^{-1}$ ];

$A_{col.}$  = área da seção transversal da coluna do experimento [ $\text{m}^2$ ];

$Q$  = vazão do gás adicionado ao experimento [ $\text{m}^3 \text{dia}^{-1}$ ].

No ensaio de De Visscher et al. (1999), os valores utilizados foram de fluxo de entrada igual a 13.4 ( $\text{mol m}^{-2} \text{dia}^{-1}$ ) para  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$ ; vazão de entrada de 7  $\text{mL min}^{-1}$

para ambos os gases; coluna com área transversal de  $0.01561 \text{ m}^2$  (diâmetro de  $0.141 \text{ m}$ ). A partir desses valores encontra-se os valores de concentração imposta ( $c_0$ ) de  $20,85 \text{ mol m}^{-3}$  para ambos os gases. Além disso, os gradientes de concentração do  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$  foram considerados iguais a zero no topo da cobertura. Na Figura 7.3 encontram-se resumidas as condições de contorno tanto para o  $\text{CH}_4$  como para o  $\text{CO}_2$ .

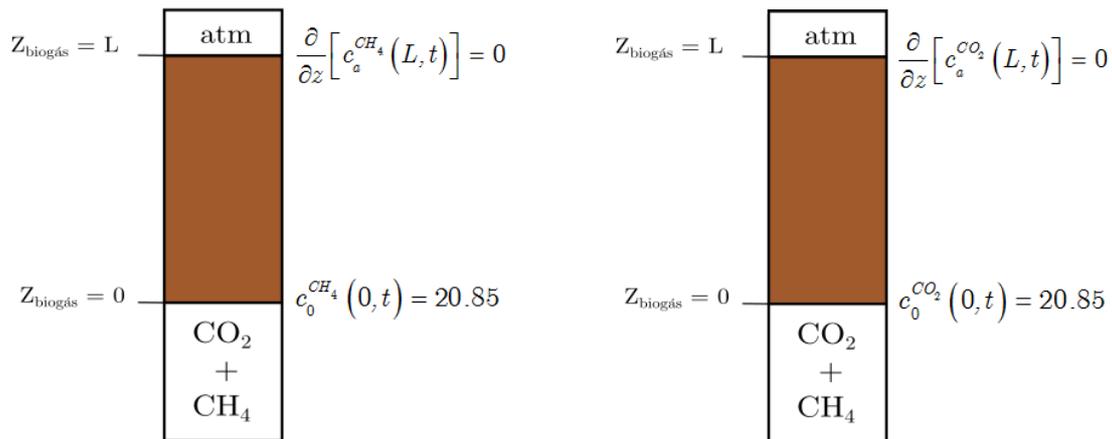


Figura 7.3 – Condições de contorno do  $\text{CH}_4$  (esquerda) e condições de contorno do  $\text{CO}_2$  (direita).

As condições de contorno para  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$  não necessitam da introdução de posições locais uma vez que as concentrações impostas de ambos os gases encontra-se no topo da camada de cobertura ( $z = 0$ ). Isso ocorre porque ambos os gases estão presentes no ar atmosférico e com isso há a introdução dos mesmos ao longo da cobertura. Assim, Na Figura 7.4 encontram-se as condições de contorno utilizadas nas soluções da equação analítica de ambos os gases ( $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$ ).

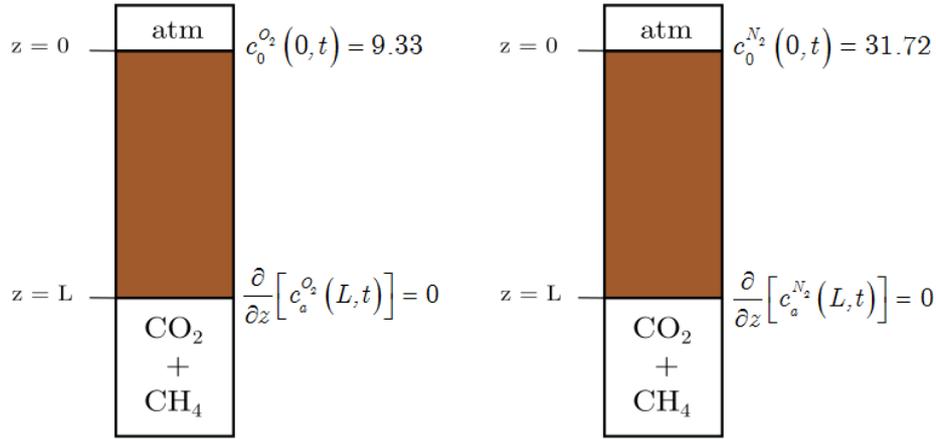


Figura 7.4 – Condições de contorno do O<sub>2</sub> (esquerda) e condições de contorno do N<sub>2</sub> (direita).

### 7.3 Processo iterativo utilizado para solução da ADE de gases

A grande dificuldade de resolver as Eqs. 7.15, 7.17, 7.19 e 7.21 deve-se a alta não-linearidade dessas. Além disso, as soluções analíticas requerem que os termos  $D_a^{n,ef}$ ,  $v_{eq}^m$  e  $\gamma^m$  sejam constantes, o que seria uma consideração não realística pois todas dependem das concentrações dos gases. Primeiramente, o coeficiente de difusão molecular do gás  $m$  ( $D_a^{n,ef}$ ) depende da fração molar dele e de todos os outros gases presentes na mistura de multicomponentes. Nessa pesquisa foi considerada a unidade constante e, assim, o termo  $v_{eq}^m$  tornou-se igual para todos os gases, porém variável devido a viscosidade da mistura de gases ( $\mu_a$ ). O termo de ordem zero ( $\gamma^m$ ) depende da taxa de oxidação do metano ( $r_{CH_4}$ ) o qual depende das concentrações de CH<sub>4</sub> e O<sub>2</sub>. Dessa forma, foi utilizada uma técnica matemática para que se pudesse incorporar os valores atualizados das concentrações nessas variáveis. Por conseguinte, todas tornaram-se variáveis ao longo do tempo e do espaço com a introdução da técnica matemática.

A técnica matemática utilizada (Figura 7.5) baseou-se em resolver as Eqs. 7.15 a 7.21 considerando  $D_a^{mef}$ ,  $v_{eq}^m$  e  $\gamma^m$  constantes. Após a solução das equações, era realizado um processo iterativo atualizando as três variáveis com o novo valor de concentrações de todos os gases encontrados. Portanto, todas as equações foram resolvidas conjuntamente e utilizando a mesma técnica matemática.

O processo iterativo somente finalizava quando encontrava-se uma diferença entre a iteração  $n+1$  e a iteração  $n$  menor que  $10^{-4}$ . O valor foi considerado pois as concentrações molares tornam-se baixas quando suas unidades são expressas em termos de gramas e quilogramas, tornando o erro desprezível. Além disso, todo processo iterativo requer um valor inicial, nessa pesquisa utilizou-se os valores de concentrações iniciais dos gases ( $c_i^m$ ) para o primeiro processo de iteração.

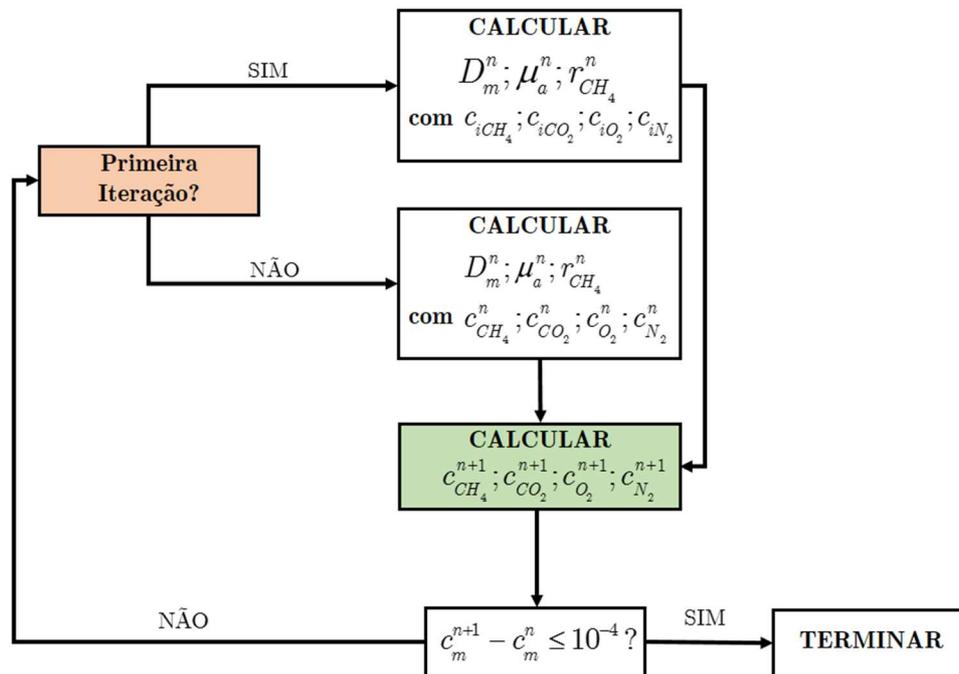


Figura 7.5 – Fluxograma do processo iterativo realizado nessa pesquisa

## 8. ANÁLISE E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

### 8.1 Validação do Modelo

Inicialmente, fez-se uma validação do modelo utilizando as condições iniciais e de contorno juntamente com o desenvolvimento matemático mencionados no capítulo 7. O material utilizado para validação foi o proposto no trabalho de De Visscher et al. (1999) e os dados para validação do modelo encontram-se no capítulo 6.

Assim, obtendo-se os valores necessários realizou-se a validação do modelo. A Figura 8.1 representa tanto os pontos amostrais da fração molar dos gases ao longo da coluna obtidos no experimento de De Visscher et al. (1999) e os valores calculados (linha cheia) por meio da metodologia proposta nesse trabalho.

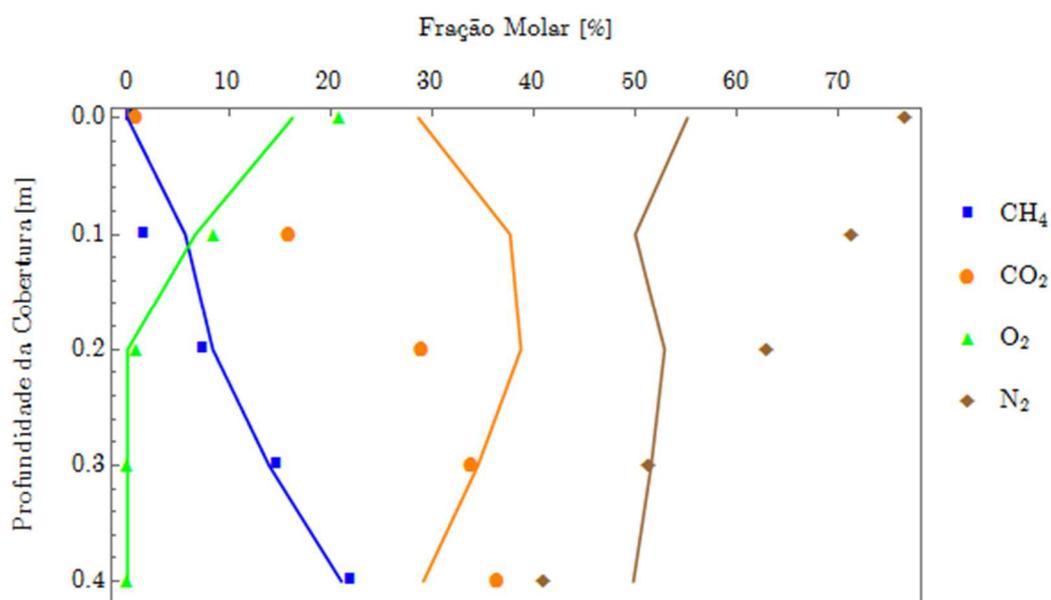


Figura 8.1 - Fração molar ao longo da coluna; comparação entre dado experimental (pontos) e calculado pelo método dessa pesquisa (linhas cheias).

Comparando os valores calculados e os obtidos pelo experimento, nota-se uma boa previsão dos valores de metano (CH<sub>4</sub>) e oxigênio (O<sub>2</sub>) e discrepância dos valores de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) e nitrogênio (N<sub>2</sub>). A má previsão obtida para os dois últimos

deve-se a uma aparente incoerência física dos dados experimentais com o fenômeno em si. Isso porque a concentração de  $\text{CH}_4$  reduz por estar sendo consumida pelo  $\text{O}_2$  (oxidação do metano). De forma contrária, os valores calculados no modelo para o  $\text{CO}_2$  aumentam pela taxa de produção do mesmo devido a oxidação do metano. Portanto, no modelo houve um aumento da concentração de  $\text{CO}_2$  ao longo da coluna, tendo, somente, uma diminuição na fração molar no topo da coluna devido as altas concentrações de  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$  encontrados na atmosfera. Por conseguinte, o modelo dessa pesquisa previu uma maior fração molar de  $\text{CO}_2$  sendo liberada no topo da coluna e uma redução de  $\text{CH}_4$  devido ao seu consumo pela oxidação do metano.

Devido a incoerência nos valores de  $\text{CO}_2$  e  $\text{N}_2$  foi realizado, também, a validação quanto a taxa de remoção de  $\text{CH}_4$  a qual também foi medida no experimento de De Visscher et al. (1999). A mesma validação foi realizada por Ng et al. (2015) e foi visto uma maior eficiência da oxidação entre calculado e medido. Dessa forma, foi realizada uma análise paramétrica para obtenção do valor da taxa de oxidação máxima do metano ( $V_{m\acute{a}x}$ ) que melhor ajustasse à validação. Assim, a Figura 8.2 mostra a validação pela metodologia dessa pesquisa e o medido no experimento utilizando um  $V_{m\acute{a}x}$  igual a  $2.32 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Esse valor representa uma redução de aproximadamente 3.2 vezes o valor medido ( $7.5 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) por De Visscher et al. (1999) (ver Tabela 6.1).

A eficiência calculada no 28º dia (Figura 8.2) utilizando o valor modificado de  $V_{m\acute{a}x}$  ( $2.32 \times 10^{-7}$ ) foi de 79.84 %, ou seja, retirou-se uma taxa de  $10.7 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ , sendo essa eficiência a mesma medida por De Visscher et al. (1999).

Outra análise realizada deve-se a variação da concentração de  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$  ao longo do tempo em diferentes posições para uma análise do comportamento de ambos os gases

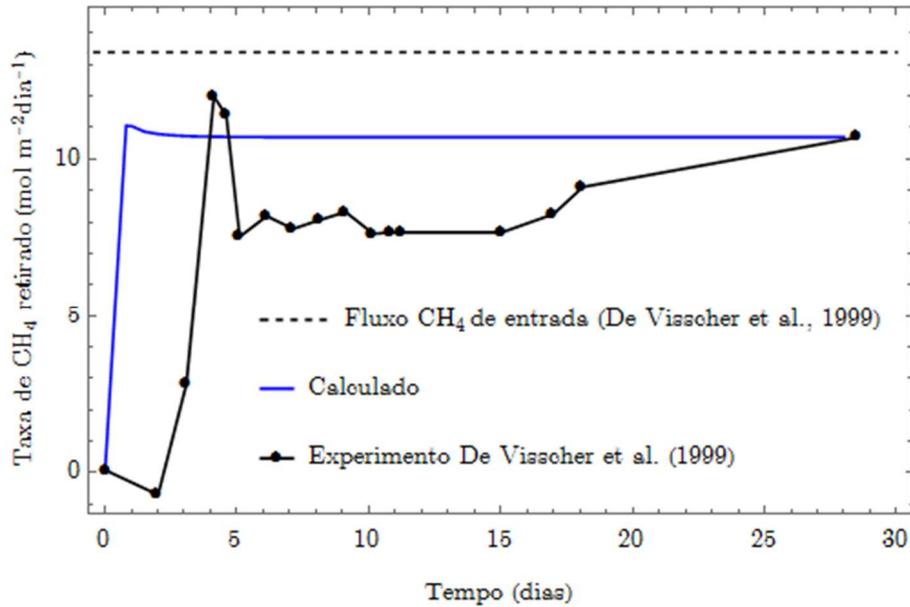


Figura 8.2 – Taxa de CH<sub>4</sub> oxidado ao longo do tempo; comparação entre dado experimental e calculado pelo método dessa pesquisa.

ao longo da coluna. Na Figura 8.3 tem-se a variação de CH<sub>4</sub> mostrando sua redução no topo da coluna devido a sua reação com o oxigênio (oxidação do metano). Além disso, pode-se observar que no topo da coluna ( $z = 0$  m) existe um atraso para a pluma de CH<sub>4</sub> chegar nessa posição, e posteriormente, uma estabilização com valores menores que profundidades mais próximas da fonte injetora do CH<sub>4</sub> e CO<sub>2</sub>.

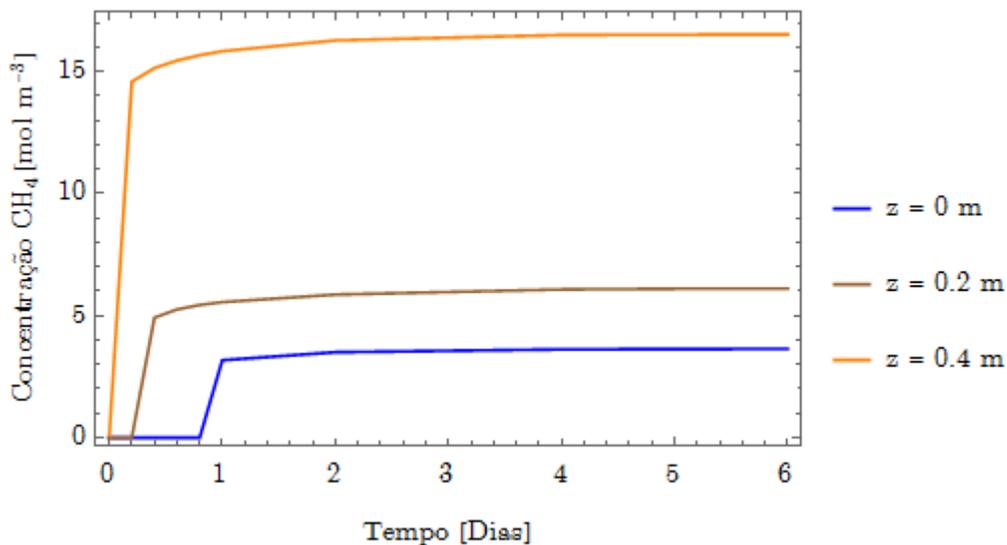


Figura 8.3 – Relação da concentração de CH<sub>4</sub> x tempo para  $z = 0, 0.2$  e  $0.4$  metros.

A Figura 8.4 tem-se a variação de  $\text{CO}_2$  onde observa-se seu aumento ao longo da coluna em direção às profundidades mais próximas do topo da cobertura. Esse fato ocorre devido a sua geração na oxidação do metano. Portanto, quanto mais distante da posição de sua geração ( $z = 0.5$  metros) maiores valores espera-se encontrar.

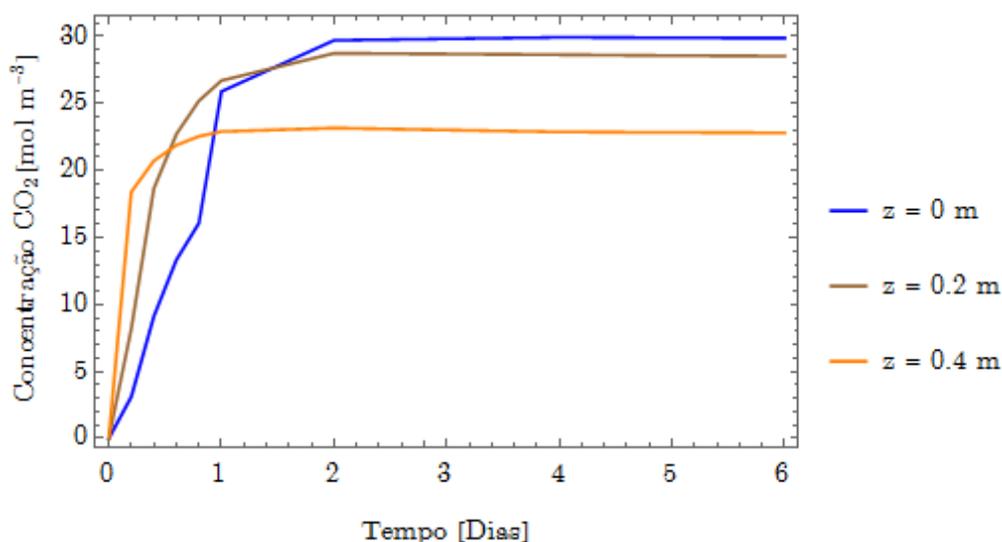


Figura 8.4 – Relação da concentração de  $\text{CO}_2$  x tempo para  $z = 0, 0.2$  e  $0.4$  metros.

A partir do modelo analítico proposto há a possibilidade de se obter a concentração gerada ao longo da coluna (profundidade da cobertura) de forma transiente. Assim, na Figura 8.5 tem-se a variação da concentração de  $\text{CH}_4$  ao longo da profundidade da cobertura simulada no experimento de De Visscher et al. (1999) com o  $V_{\text{máx}}$  igual a  $2.32 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Percebe-se que a concentração de  $\text{CH}_4$  para profundidades maiores é mais elevada devido à proximidade da fonte injetora dos gases ( $\text{CH}_4 + \text{CO}_2$ ). No experimento, a fonte injetora encontrava-se em  $z = 0.5$  metro e, assim, onde os valores encontrados são maiores. Interessante perceber que a pluma de concentração de  $\text{CH}_4$  leva um tempo até chegar na superfície. Dessa forma, em  $t = 0.5$  dia não há concentrações de  $\text{CH}_4$  nas camadas mais superficiais. Porém, percebe-se que

há uma rápida estabilização de sua concentração uma vez que a diferença entre  $t = 1$  dia e  $t = 28$  dias é praticamente desprezível. A Figura 8.3 mostra a estabilização da concentração de  $\text{CH}_4$  em torno do 2º dia, evidenciando o motivo da proximidade das duas curvas (1º dia e 28º dia). Além disso, vemos que a estabilização do metano encontra-se entorno de  $3.64 \text{ mol m}^{-3}$ .

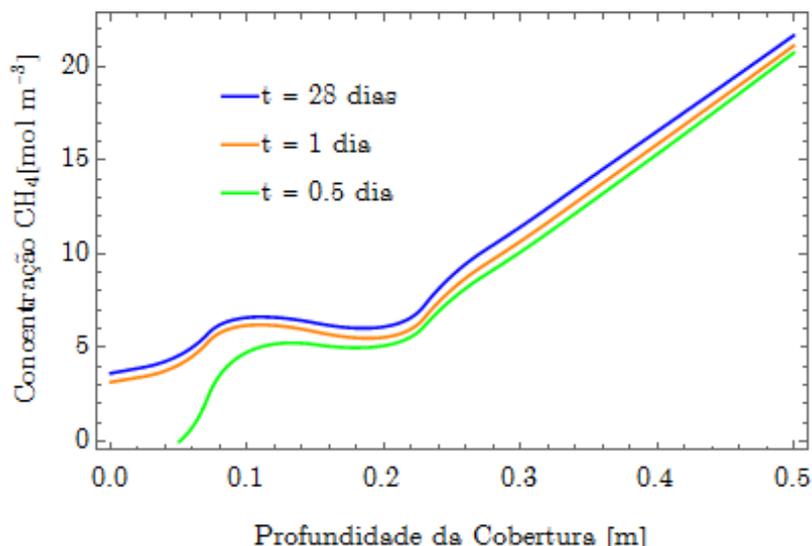


Figura 8.5 – Relação da concentração de  $\text{CH}_4$  x profundidade da cobertura para  $t = 0.5, 1$  e 28 dias.

Na Figura 8.6 tem-se a variação da concentração do  $\text{CO}_2$  ao longo da profundidade da cobertura do experimento realizado. Percebe-se que para  $t = 0.5$  dia a concentração de  $\text{CO}_2$  é maior perto da fonte injetora ( $z = 0.5 \text{ m}$ ) e menor nas camadas mais superficiais. Contudo, ao longo do tempo o  $\text{CO}_2$  aumenta e supera a concentração na fonte injetora e isso deve-se a sua geração na oxidação do metano. De forma semelhante ao  $\text{CH}_4$ , o  $\text{CO}_2$  leva um período de 2 dias para sua estabilização (Figura 8.4).

As Figuras 8.7 indica a variação da concentração do  $\text{O}_2$  ao longo da profundidade da cobertura. O  $\text{O}_2$  tem sua concentração diminuída quanto mais se aproxima da fonte

geradora do biogás ( $\text{CH}_4 + \text{CO}_2$ ), o que está relacionado ao seu consumo durante a oxidação do metano. Embora haja todo seu consumo em profundidades maiores, em profundidades superficiais a sua concentração aumenta devido a sua disponibilidade na atmosfera. Quanto ao  $\text{N}_2$ , a sua concentração permanece constante e igual aos valores da atmosfera ( $31.7 \text{ mol m}^{-3}$ ) uma vez que ele não é consumido e, assim, tornando-se disponível ao longo da profundidade da cobertura.

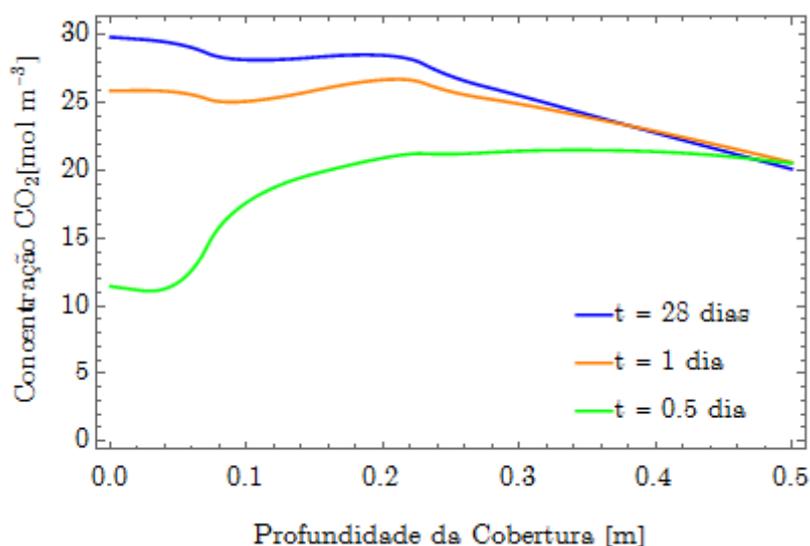


Figura 8.6 – Relação da concentração de  $\text{CO}_2$  x profundidade da cobertura para  $t = 0.5, 1$  e  $28$  dias.

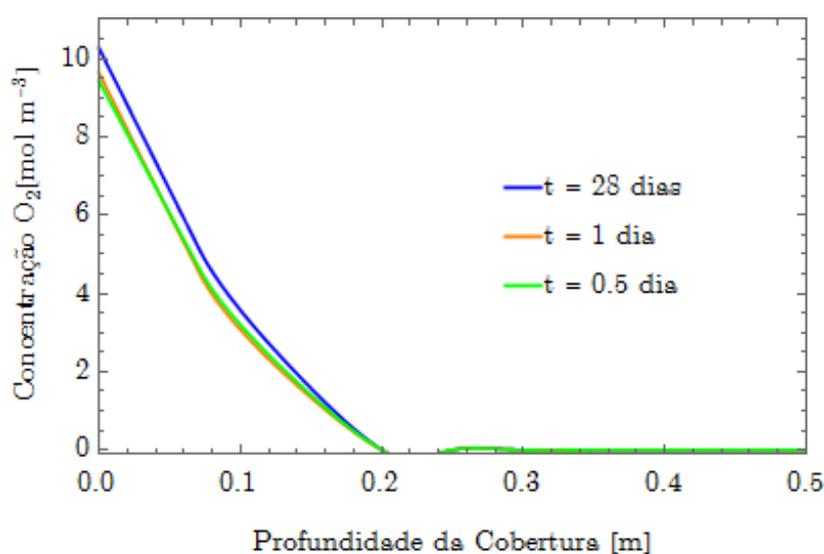


Figura 8.7 – Relação da concentração de  $\text{O}_2$  x profundidade da cobertura para  $t = 0.5, 1$  e  $28$  dias.

Além dos dados de concentração que o modelo analítico proposto fornece, tem-se também a possibilidade de obter os valores da viscosidade, velocidade advectiva dos gases e o coeficiente de difusão molecular ao longo da coluna e tempo. Dessa forma, na Figura 8.8 apresenta-se a viscosidade da mistura de gases ao longo da coluna para  $t = 28$  dias. Assim, é possível visualizar uma diminuição da viscosidade em direção a fonte injetora do biogás. Simultaneamente, espera-se que a velocidade dos gases tenham uma resposta contrária a viscosidade. Portanto, na Figura 8.9 vê-se que há um aumento da velocidade em direção à fonte injetora. Devido a umidade ser considerada constante durante o processo, as velocidades dos gases tornam-se iguais, isto é,  $v_{eq}^{CH_4} = v_{eq}^{CO_2} = v_{eq}^{O_2} = v_{eq}^{N_2}$ , pois a velocidade de percolação da água é nula ( $v_{r,zw} = 0$ ). Essa característica pode ser observada quando considera-se  $v_{r,zw} = 0$  na Eq. (7.14). Além do mais, a velocidade encontrada nessa pesquisa encontra-se em torno do valor constante utilizado por Yao et al. (2015) igual a  $6.95 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$ .

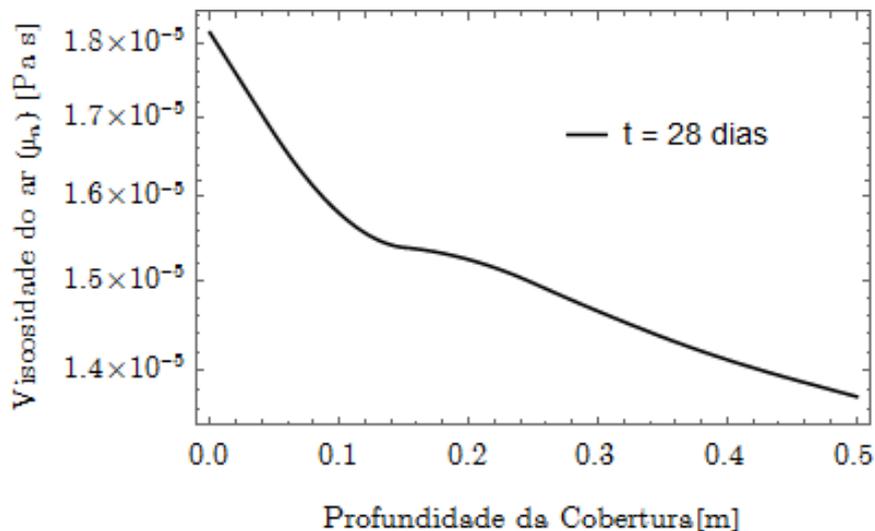


Figura 8.8 – Variação da viscosidade do ar calculada ao longo da cobertura.

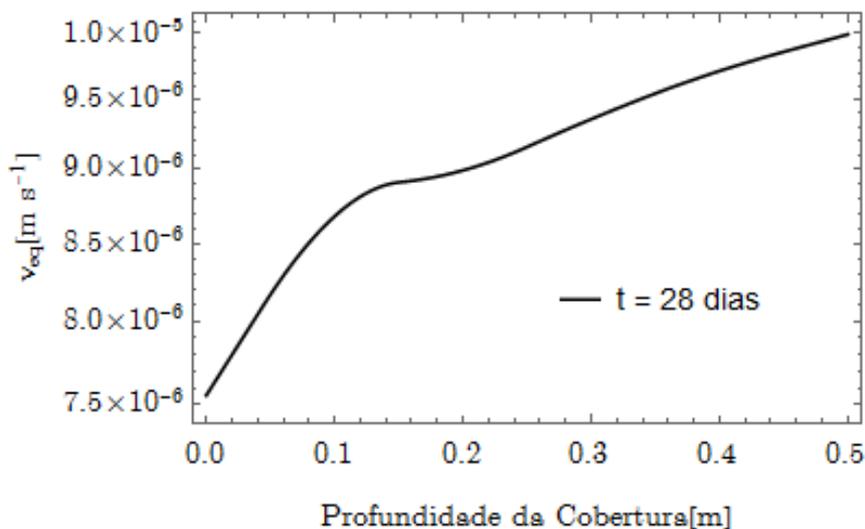


Figura 8.9 – Variação da velocidade equivalente dos gases ao longo da cobertura.

Nas Figuras 8.10 e 8.11, apresentam-se os coeficientes de difusão molecular do  $CH_4$  e  $CO_2$ , respectivamente. Nota-se que os valores de difusão molecular de  $CH_4$  são maiores que do  $CO_2$  apesar da maior concentração molar desse, como visto anteriormente. Segundo Ng et al. (2015), esse fato decorre do processo de oxidação do metano o qual diminui as concentrações de metano e aumenta as de dióxido de carbono. Portanto, mesmo o coeficiente de difusão molecular do metano sendo maior, a sua menor concentração explica-se por sua reação com o oxigênio (oxidação do metano).

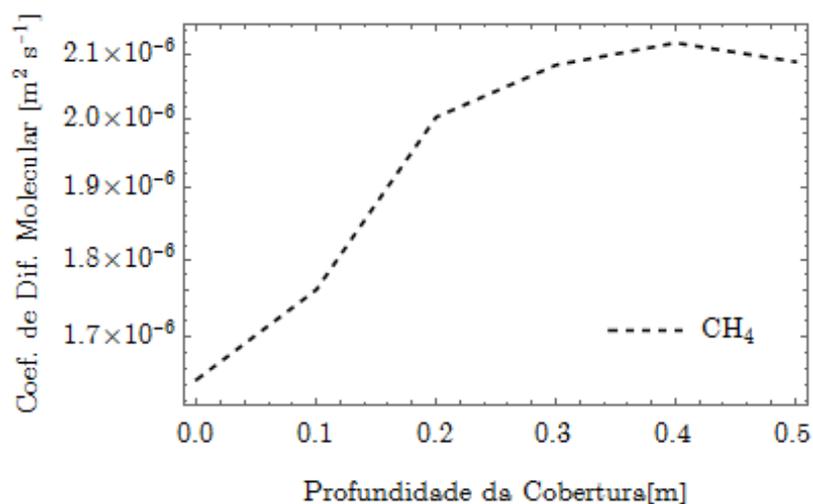


Figura 8.10 – Variação do coeficiente de difusão molecular do metano ( $CH_4$ ) ao longo da coluna para  $t = 28$  dias.

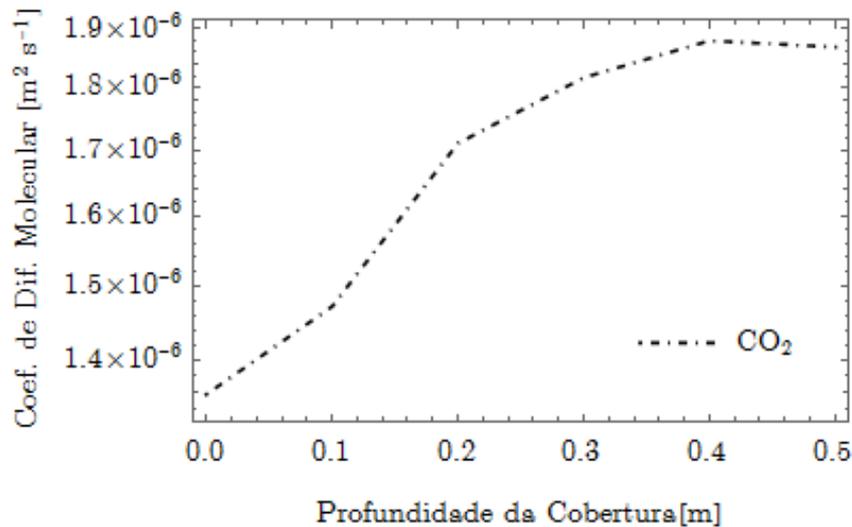


Figura 8.11 – Variação do coeficiente molecular do dióxido de carbono ( $CO_2$ ) ao longo da coluna para  $t = 28$  dias.

Uma das facilidades da obtenção de uma solução analítica está em obter as taxas de variação da variável dependente (concentração dos gases) em relação as variáveis independentes (tempo e posição). Dessa forma, primeiramente foi realizado uma verificação das taxas temporais do metano e do dióxido de carbono. O principal objetivo desse resultado é uma verificação se os resultados obtidos são coerentes com o processo físico do transporte dos gases. Assim, analisando-se a Figura 8.12 vê-se que para uma dada posição ( $z$ ), a taxa de variação de  $CH_4$  é nula por um período inicial, sendo essa característica mais expressiva quanto mais longe está da fonte geradora dos gases. Assim, por um período de tempo a concentração do metano em certa posição se mantém igual a inicial (considerada igual a zero). Após o início da geração do metano, inicia-se uma variação desse ao longo da coluna e tempo. Por conseguinte, a taxa de variação da concentração aumenta atingindo o seu valor de pico  $[(\partial c_{CH_4}/\partial t)_{m\acute{a}x}]$ . Esse pico corresponde a inclinação máxima observada na Figura 8.3, sendo que após o pico há um decaimento da taxa de variação até atingir um valor nulo.

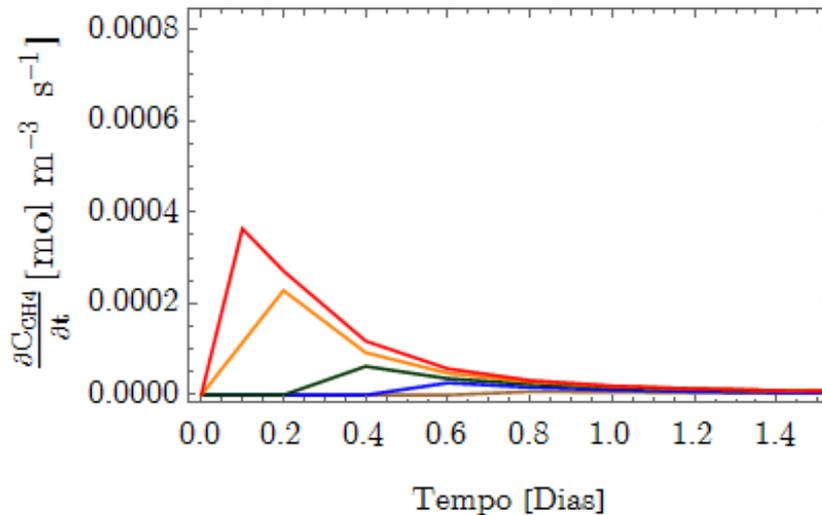


Figura 8.12 – Previsão do histórico temporal das taxas de concentração do metano em diferentes posições do solo ensaiado.

De forma semelhante, a Figura 8.13 representa a taxa de variação temporal do  $\text{CO}_2$ . Portanto, a taxa de variação da concentração aumenta atingindo o seu valor de pico  $[(\partial c_{\text{CO}_2}/\partial t)_{\text{máx}}]$  para as diferentes profundidades. Esse pico corresponde a inclinação máxima observada na Figura 8.4, sendo que após o pico há um decaimento da taxa de variação até atingir um valor nulo. O valor nulo está relacionado a um valor constante atingido pelo valor da concentração ao longo do tempo. Além disso, comparando as Figuras 8.12 e 8.13 percebe-se maiores valores da taxa de variação temporal do  $\text{CO}_2$  do que a de  $\text{CH}_4$ . Esse fenômeno está relacionado a maiores valores de  $\text{CO}_2$  serem encontrados devido a oxidação do metano, gerando  $\text{CO}_2$ .

Além da obtenção da taxa de variação temporal da concentração do metano, foi realizado também a análise da taxa de variação espacial. Assim, na Figura 8.14 tem-se a taxa de variação espacial do  $\text{CH}_4$  na superfície do solo de cobertura advinda do experimento da validação. Os valores obtidos são bastante semelhantes aos encontrados por Guan et al. (2016) para a taxa de variação espacial no topo da coluna em análise. Além disso, a Figura 8.15 tem-se a mesma taxa, contudo, em profundidades diferentes

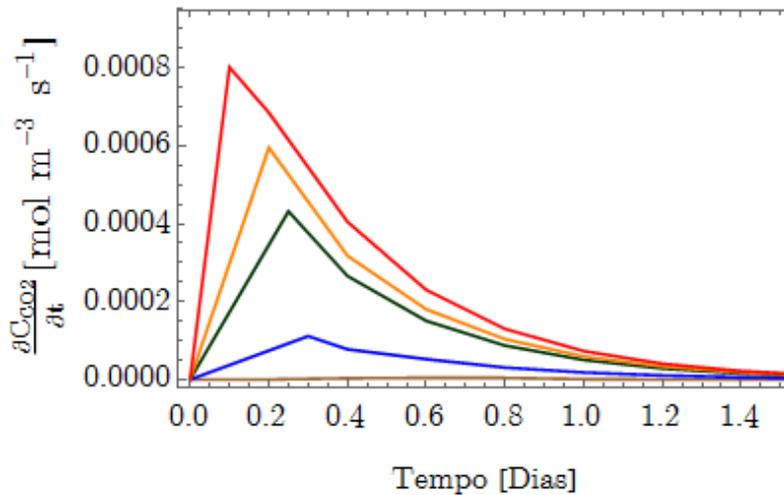


Figura 8.13 – Previsão do histórico temporal das taxas de concentração do dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) em diferentes profundidades do solo ensaiado.

da coluna analisada. Percebe-se que quanto maior a distância da fonte emissora dos gases, maior é o tempo necessário para que haja um acréscimo da taxa de variação do metano, sendo que após o acréscimo existe uma estabilização do valor. Interessante notar também que quanto mais próximo da fonte geradora, maior é o pico existente antes da estabilização do valor da taxa de variação espacial da concentração. Esse pico está relacionado à redução abrupta que o metano sofre devido a oxidação e ao oxigênio inicialmente disponível.

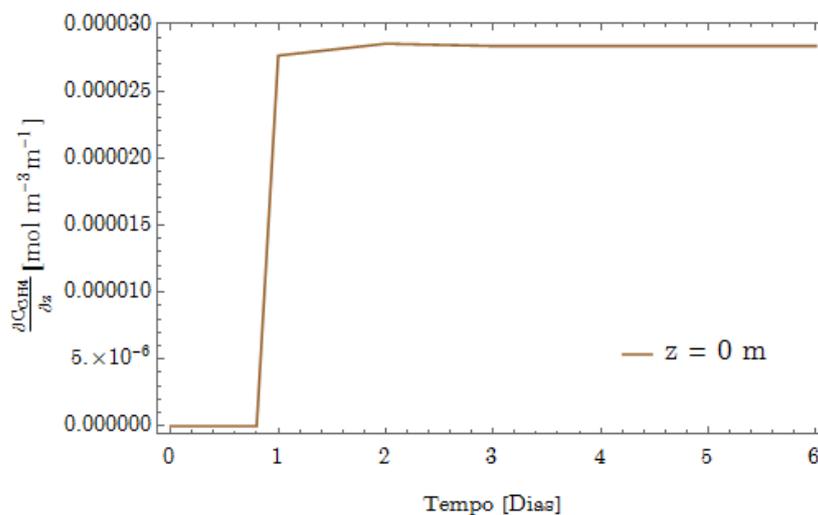


Figura 8.14 – Previsão da taxa espacial do metano ao longo do tempo no topo da coluna.

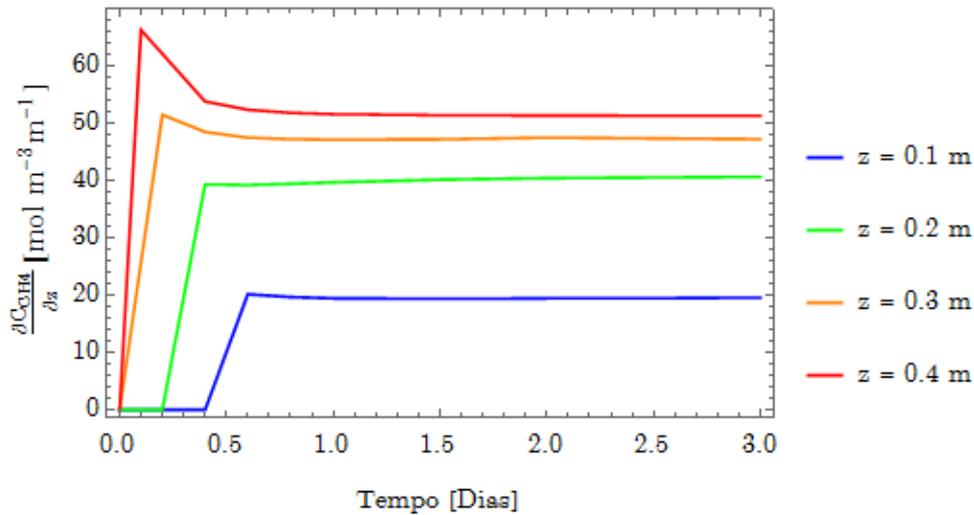


Figura 8.15 – Previsão da taxa espacial do metano ao longo do tempo em diferentes posições.

## 8.2 Análise Paramétrica dos parâmetros que alteram significativamente o transporte, oxidação e emissão de CH<sub>4</sub>

### 8.2.1 Influência da taxa máxima de consumo de CH<sub>4</sub> ( $V_{máx}$ ) e da constante da taxa de meia saturação do CH<sub>4</sub> ( $K_{CH_4}$ )

Primeiramente, foram realizadas análises paramétricas devido a importância dos valores de  $V_{máx}$  (mol kg<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>) e  $K_{CH_4}$  (adimensional), sendo que ambos têm grande influência na capacidade de oxidação do metano. Portanto, na Figura 8.16 vê-se o comportamento da concentração do CH<sub>4</sub> no topo da coluna ( $z = 0$  metros) para diferentes  $V_{máx}$ . Dessa forma, percebe-se que maiores valores de  $V_{máx}$  possibilitam em um maior consumo de CH<sub>4</sub> devido a maior capacidade de oxidação do metano. Além disso, na Figura 8.17 vê-se o comportamento da concentração do metano ao longo da profundidade da cobertura para diversos  $V_{máx}$ . Em ambas figuras (8.16 e 8.17) têm-se que o consumo de metano ocasionado pelas  $V_{máx} = 7.5 \times 10^{-8}$  e  $10^{-7}$  mol kg<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup> tem efeitos relativamente próximos quanto a oxidação do metano. Contudo, somente uma pequena

variação ( $V_{m\acute{a}x} = 1.5 \times 10^{-7}$ ) j\`a produz uma significativa oxida\`c\`ao do metano.

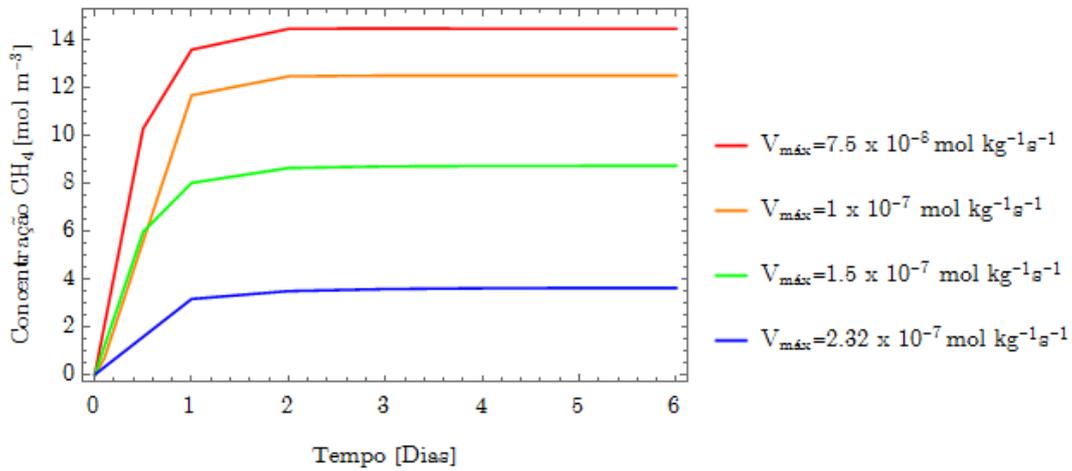


Figura 8.16 – Concentra\`c\`ao do metano temporal para diferentes  $V_{m\acute{a}x}$  em  $z = 0$  metros.

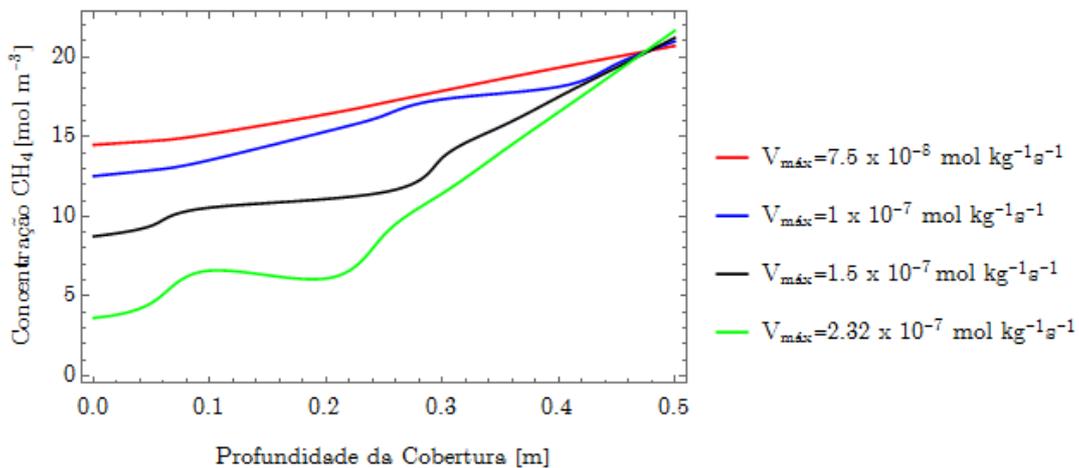


Figura 8.17 – Concentra\`c\`ao do metano ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes  $V_{m\acute{a}x}$  em  $t = 28$  dias e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

Devido ao processo de oxida\`c\`ao do metano, o consumo de oxig\`enio e a gera\`c\`ao de di\`oxido de carbono s\`ao efeitos necess\`arios. Assim, na Figura 8.18 v\`e-se como a taxa de produ\`c\`ao de  $\text{CO}_2$  torna-se altamente dependente de  $V_{m\acute{a}x}$  e, conseq\`uentemente, a taxa de consumo de  $\text{O}_2$  tamb\`em (Figura 8.19). Por conseguinte, maiores valores de  $V_{m\acute{a}x}$  acarretam maior consumo de  $\text{CH}_4$  e  $\text{O}_2$  e uma maior produ\`c\`ao de  $\text{CO}_2$ . Vale destacar quanto ao consumo de  $\text{O}_2$  que a sua disponibilidade ao longo da profundidade da coluna

(Figura 8.19) está diretamente relacionada ao valor de  $V_{m\acute{a}x}$ .

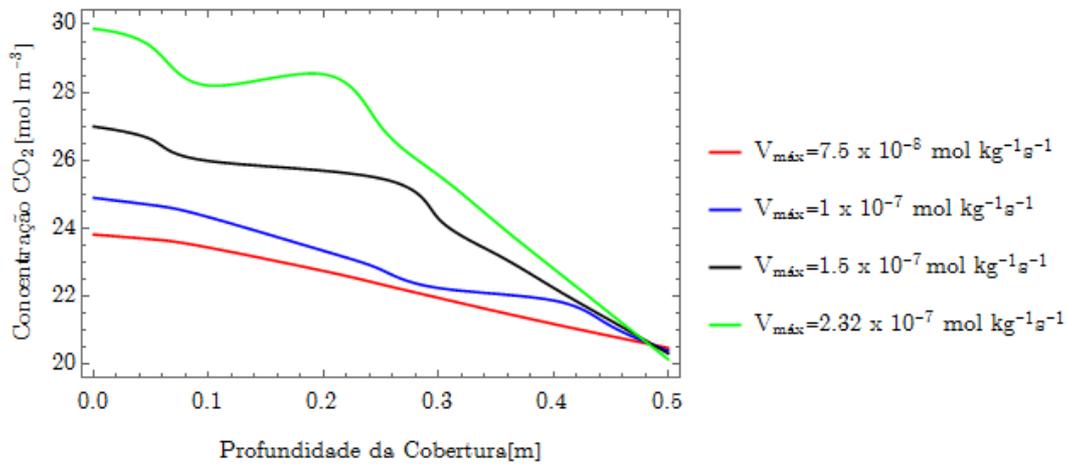


Figura 8.18 – Concentração do dióxido de carbono ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes  $V_{m\acute{a}x}$  em  $t = 28$  dias e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

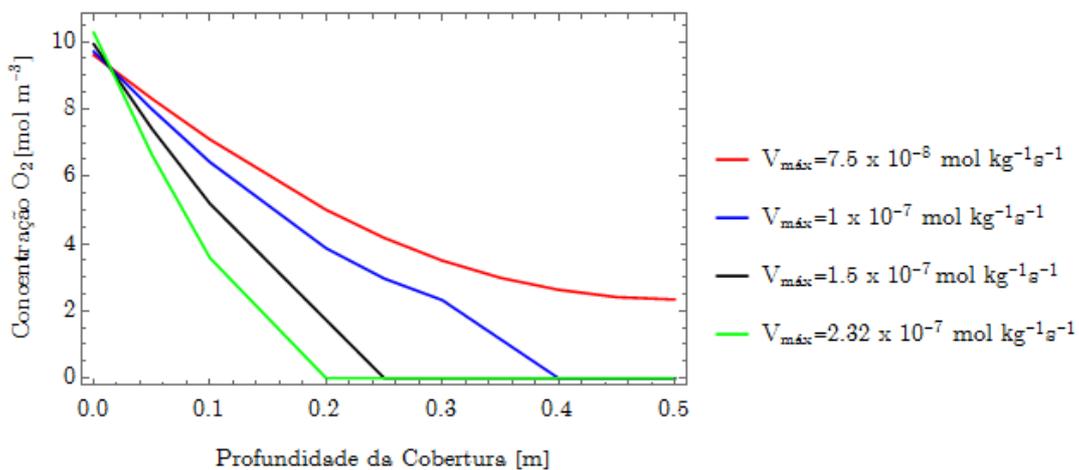


Figura 8.19 – Concentração do oxigênio ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes  $V_{m\acute{a}x}$  em  $t = 28$  dias e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

Assim, comparando-se os valores de  $7.5 \times 10^{-8}$  e  $2.32 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1}\text{s}^{-1}$  vê-se que para um menor valor de  $V_{m\acute{a}x}$  possibilita um consumo moderado, permitindo ainda que haja concentrações de oxigênio ao longo da coluna. Porém, o último, há grande consumo do oxigênio gerando sua indisponibilidade a partir da profundidade de 0.2 metros.

Quanto ao nitrogênio, não há sua produção e nem consumo por parte de reações químicas e sua disponibilidade está diretamente relacionada ao ar atmosférico.

Portanto, a sua concentração (Figura 8.20) torna-se constante ao longo do tempo e profundidade pela dificuldade de sua retirada dos vazios do solo. Dessa forma, o processo de difusão molecular torna-se um fator essencial que permite a constância de sua concentração nos vazios do solo.

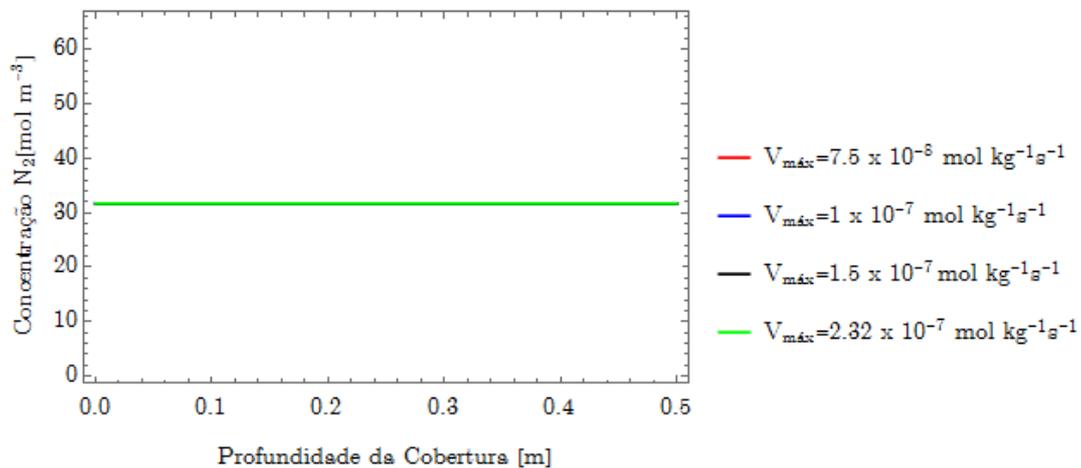


Figura 8.20 – Concentração do nitrogênio ao longo da profundidade do solo de cobertura para diferentes  $V_{máx}$  em  $t = 28$  dias e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

Outra forma de analisar a importância da  $V_{máx}$  é por meio da eficiência da oxidação. Dessa forma, analisando o fluxo ao longo da profundidade foram realizados estudos da eficiência da oxidação (calculado pela Eq. 5.9,  $O_{ef}$ ) para diferentes  $V_{máx}$  conforme a Figura 8.21. Nessa, percebe-se que para menores valores de  $V_{máx}$  menores eficiência de oxidação são obtidas. Além disso, nota-se para baixos valores de  $V_{máx}$  a  $O_{ef}$  é mais expressiva nas profundidades mais superficiais. De forma contrária, para o maior valor da  $V_{máx}$  analisado ( $4 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) tem-se eficiência de oxidação chegando a 100%, significando a não emissão do metano para atmosfera ( $z = 0$  metros). Observa-se ainda que todo metano produzido na fonte injetora é consumido ao longo da profundidade entre 0.25 e 0.5 metros. A Figura 8.22 é uma análise do fluxo de  $\text{CH}_4$  ( $\text{mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ ) oxidado ao longo da profundidade, ou seja, é a taxa de fluxo do  $\text{CH}_4$

retirado devido a oxidação do metano, calculada conforme Eq. (5.10).

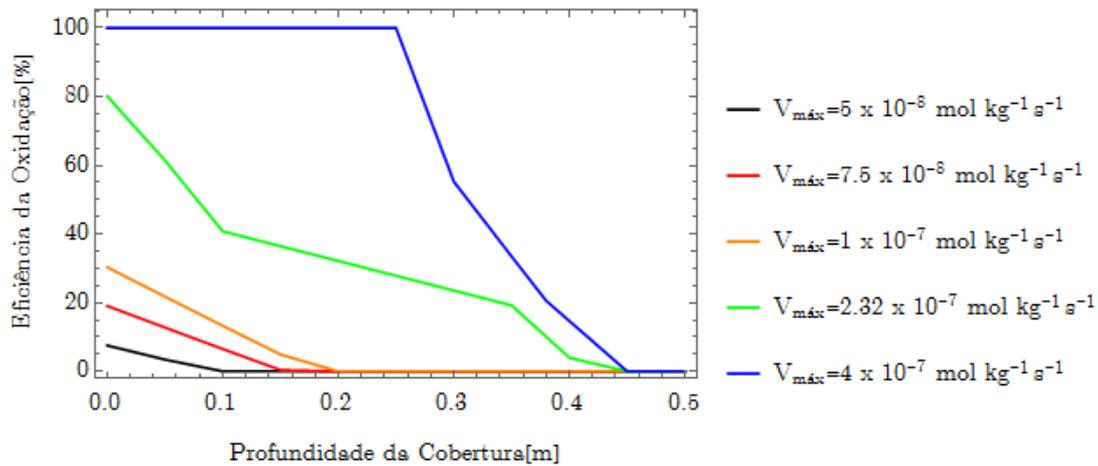


Figura 8.21 – Eficiência da oxidação ao longo da profundidade da cobertura para diferentes  $V_{máx}$  em  $t = 28$  dias e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

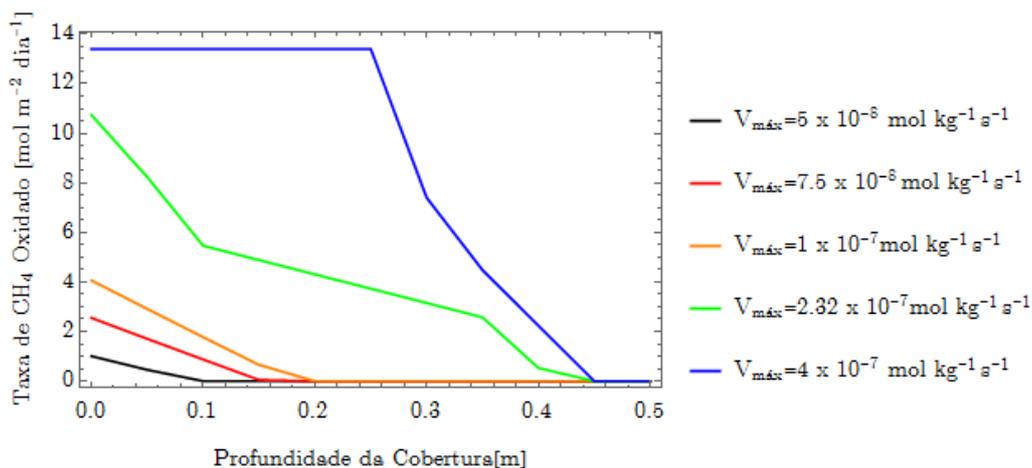


Figura 8.22 – Eficiência da oxidação ao longo da profundidade da cobertura para diferentes  $V_{máx}$  em  $t = 28$  dias e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

Outra análise realizada deve-se aos efeitos da taxa de meia saturação do metano ( $K_{CH_4}$ ) no processo de oxidação do metano. Assim, foi analisada a importância dele juntamente aos efeitos da  $V_{máx}$  para o fenômeno da oxidação do metano. Na Figura 8.23 nota-se que para um mesmo valor da  $V_{máx}$  menor é a eficiência da oxidação quanto maior for o valor de  $K_{CH_4}$ . Pode-se perceber também que para o maior valor da  $K_{CH_4}$  analisado (0.1), existe uma maior dificuldade para retirada do metano (oxidação do

metano). Esse fato está diretamente relacionado à taxa de oxidação do metano ( $r_{CH_4}$ ) que é inversamente proporcional a  $K_{CH_4}$ . Além disso, a partir dessas análises é possível também uma comparação do fluxo de  $CH_4$  emitido e seu comportamento quanto aos valores de  $V_{máx}$  e  $K_{CH_4}$  (Figura 8.24).

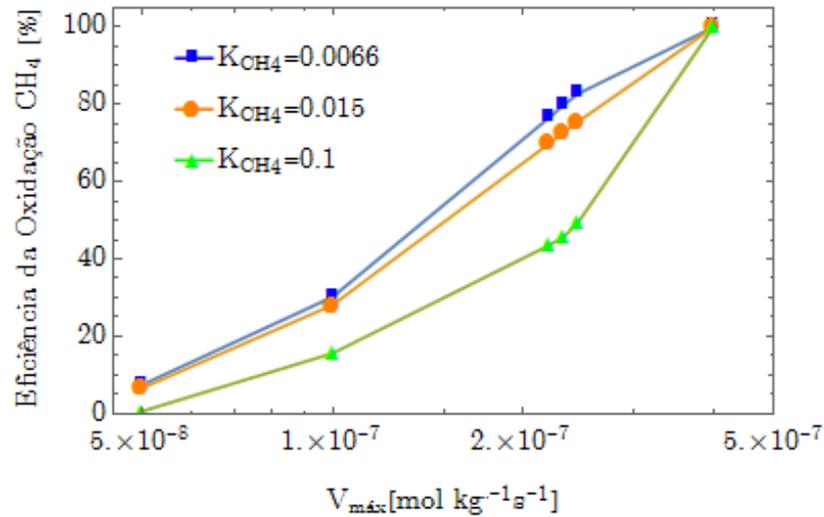


Figura 8.23 – Eficiência da oxidação para diferentes  $V_{máx}$  e  $K_{CH_4}$  em  $t = 28$  dias,  $z = 0$  metros e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

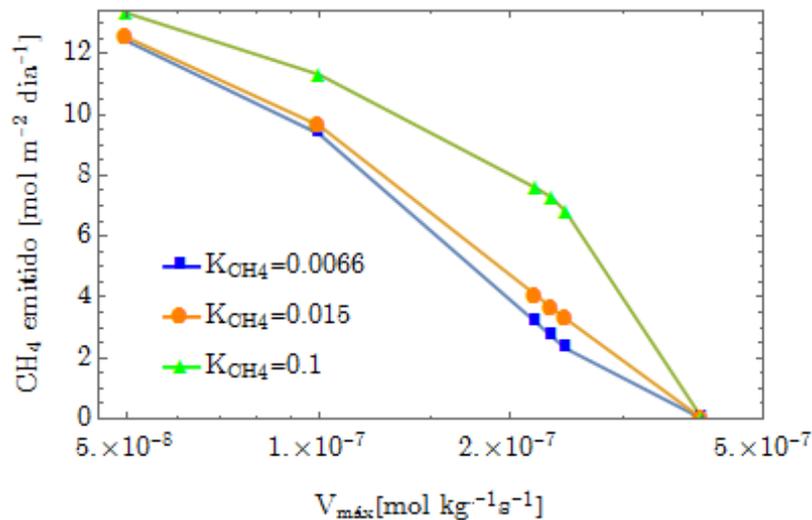


Figura 8.24 – Fluxo de  $CH_4$  emitido para diferentes  $V_{máx}$  ( $\text{mol kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ ) e  $K_{CH_4}$  em  $t = 28$  dias,  $z = 0$  metros e  $J_{in} = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

### 8.3 Utilização da metodologia para dimensionamento da espessura ( $L$ ) da cobertura de aterro sanitário

A importância de avaliar o comportamento da eficiência da oxidação ao longo de diferentes espessuras de cobertura surge pela necessidade de ter informações adequadas de critérios de projeto. Assim, verificações podem ser realizadas para que se obtenha uma relação entre a eficiência da oxidação e diferentes espessuras da cobertura para um certo tipo de solo. Por conseguinte, a Figura 8.25 mostra a dependência da eficiência da oxidação em termos de diferentes espessuras da cobertura para um solo com  $V_{m\acute{a}x} = 5 \times 10^{-8} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$  e  $K_{CH_4} = 10^{-3}$ . Pode-se ver um aumento praticamente linear da eficiência da oxidação, no topo da cobertura analisada, com o aumento da espessura da cobertura.

Além disso, é conveniente verificar a dependência da eficiência da oxidação ( $O_{ef}$ ) para diversas espessuras da cobertura ( $L$ ) e com valores variáveis da  $V_{m\acute{a}x}$ . Portanto, na Figura 8.26, tem-se a dependência desses três parâmetros, auxiliando na escolha da melhor espessura da cobertura em projetos. Pode-se observar que maiores valores de  $V_{m\acute{a}x}$  acarretam na menor necessidade da espessura da cobertura, enquanto que baixos valores de  $V_{m\acute{a}x}$  não necessariamente retiram totalmente o metano injetado no sistema.

A Figura 8.26 pode ser mostrada na forma de uma superfície, portanto, a Figura 8.27 representa a superfície que mostra relação entre a eficiência da oxidação, espessura da cobertura e  $V_{m\acute{a}x}$ . Assim, observa-se que baixos valores de espessuras e  $V_{m\acute{a}x}$  a eficiência da oxidação ( $O_{ef}$ ) torna-se baixa da mesma forma. De forma contrária, nota-se uma expressiva região (em vermelho) onde existe uma alta eficiência de oxidação

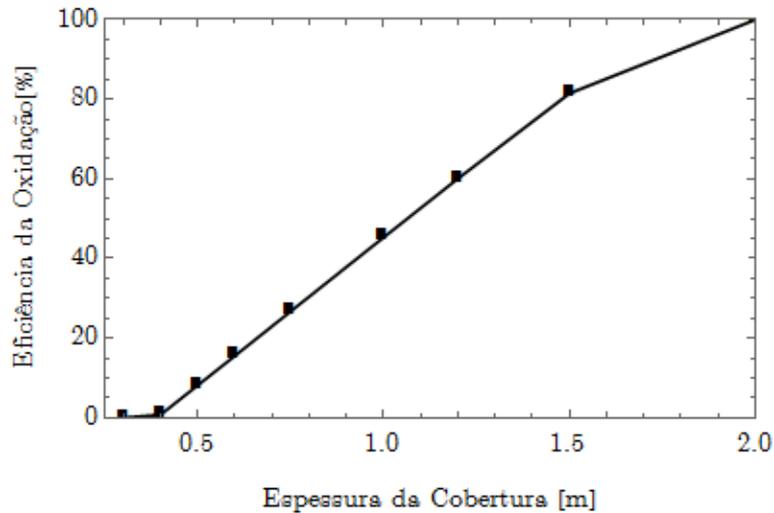


Figura 8.25 – Eficiência da oxidação em diferentes espessuras da cobertura em  $t = 28$  dias e  $z = 0$  m considerando:  $V_{m\acute{a}x} = 5 \times 10^{-8} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $K_{CH_4} = 10^{-3}$ ,  $J_m = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

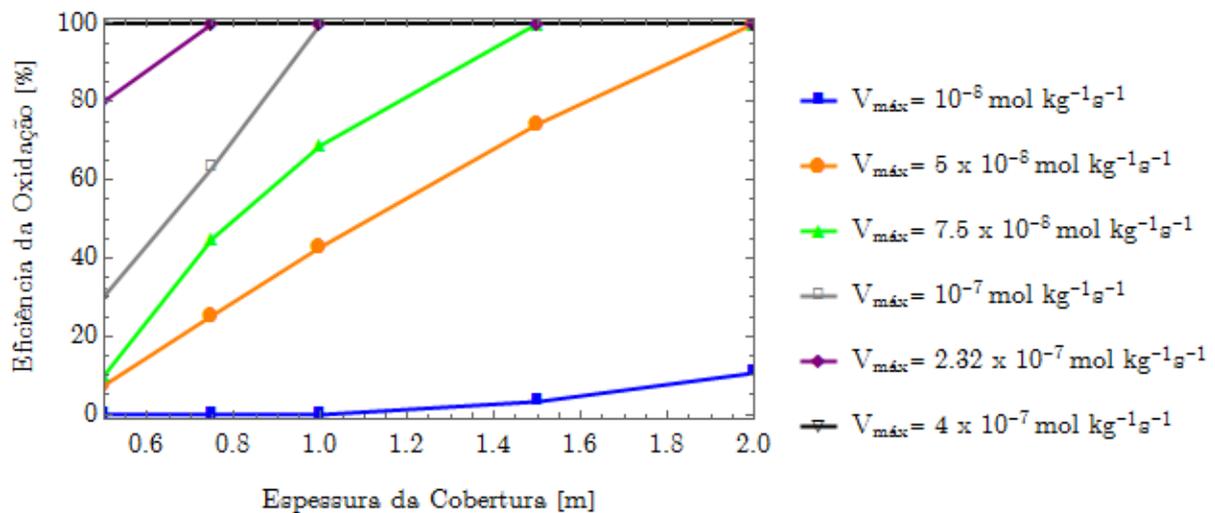


Figura 8.26 – Eficiência da oxidação em diferentes espessuras da cobertura e  $V_{m\acute{a}x}$  ( $\text{mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) em  $t = 28$  dias e  $z = 0$  metros para as seguintes propriedades:  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ ,  $J_m = 13.4 \text{ mol m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$ .

(em torno de 100%) para amplo valor de espessura da cobertura, mas somente ocorre para altos valores de  $V_{m\acute{a}x}$ .

Além de saber como ocorre a eficiência da oxidação no topo da cobertura analisada, é interessante conhecer o comportamento da eficiência ao longo de diferentes profundidades para diferentes espessuras da camada de cobertura. Portanto, nas

Figuras 8.28(a,b,c,d) apresentam-se o comportamento da eficiência da oxidação para os casos de espessura das cobertura de  $L = 0.5$ ;  $0.75$ ;  $1$  e  $1.5$  m, com a  $V_{m\acute{a}x} = 1 \times 10^{-7}$  mol kg<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> e  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ , para diferentes profundidades dessas espessuras. Dessa forma, com essas propriedades vê-se somente uma eficiência de 100% para as espessuras

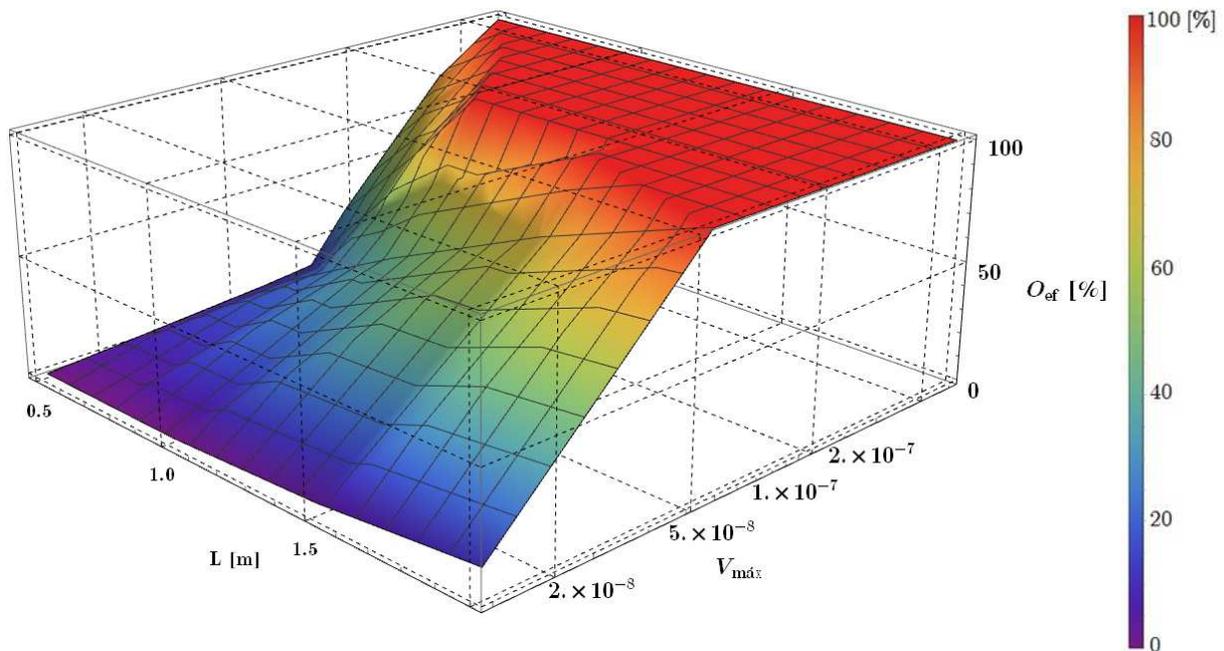


Figura 8.27 – Eficiência da oxidação ( $O_{ef}$ ) x espessura da cobertura ( $L$ ) x  $V_{m\acute{a}x}$  (mol kg<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>) analisadas em  $t = 28$  dias e  $z = 0$  m considerando-se:  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ ,  $J_{in} = 13.4$  mol m<sup>-2</sup> dia<sup>-1</sup>.

de 1 e 1.5. Na última, ocorre uma retirada completa já em profundidades em torno de 0.8 metros, mostrando assim, uma relação direta entre o aumento da espessura da cobertura e eficiência da oxidação. Contudo, a espessura de 1 metro mostra uma eficiência de 100%, mostrando que nem sempre é necessário grandes espessuras para que ocorra a completa oxidação do metano. Analisando-se as espessuras de 0.5 e 0.75m, percebe-se que um pequeno aumento de espessura (0.25m) gera um aumento de praticamente duas vezes na eficiência da oxidação no topo da cobertura. Assim, a

geração e análise dos gráficos mostrados permite uma maior confiabilidade na escolha da espessura adequada na construção de aterros sanitários.

Outro fator de grande importância no transporte de gases e que afeta de maneira considerável a eficiência da oxidação está associado com a taxa de produção do  $\text{CH}_4$

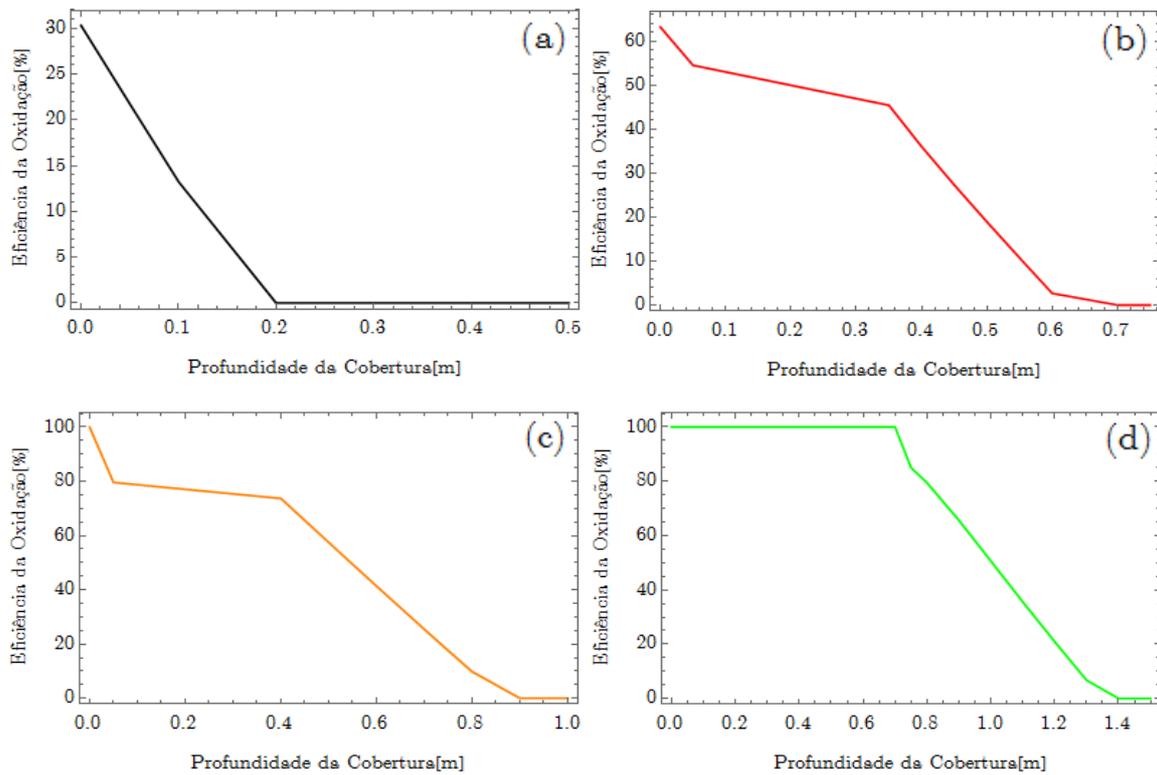


Figura 8.28 – Eficiência da oxidação ( $O_{ef}$ ) em  $t = 28$  dias com parâmetros  $V_{max} = 10^{-7}$  mol  $\text{kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ ,  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$  e  $J_m = 13.4$  mol  $\text{m}^{-2} \text{dia}^{-1}$  ao longo da cobertura com espessura de (a) 0.5 metro; (b) 0.75 metro; (c) 1 metro; (d) 1.5 metros.

Outro fator de grande importância no transporte de gases e que afeta de maneira considerável a eficiência da oxidação está associado com a taxa de produção do  $\text{CH}_4$ . Portanto, a Figura 8.29 apresenta o comportamento da eficiência da oxidação para diversas espessuras de cobertura variando a taxa de produção de  $\text{CH}_4$ . A taxa de produção de referência escolhida foi o valor utilizado no trabalho de De Visscher et al. (1999), que corresponde a  $1.55 \times 10^{-4}$  mol  $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$  ( $13.4$  mol  $\text{m}^{-2} \text{dia}^{-1}$ ). Os outros valores escolhidos corresponde a esse valor reduzido em 5 vezes ( $3.1 \times 10^{-5}$  mol  $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) e

aumentado em 5 vezes ( $7.75 \times 10^{-4} \text{ mol m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ). Por conseguinte, vê-se na Figura 8.29 que o comportamento das taxas de produção de  $3.1 \times 10^{-5}$  e  $1.55 \times 10^{-4}$  são próximos, contudo para o maior valor ( $7.75 \times 10^{-4}$ ) a eficiência de oxidação reduz consideravelmente.

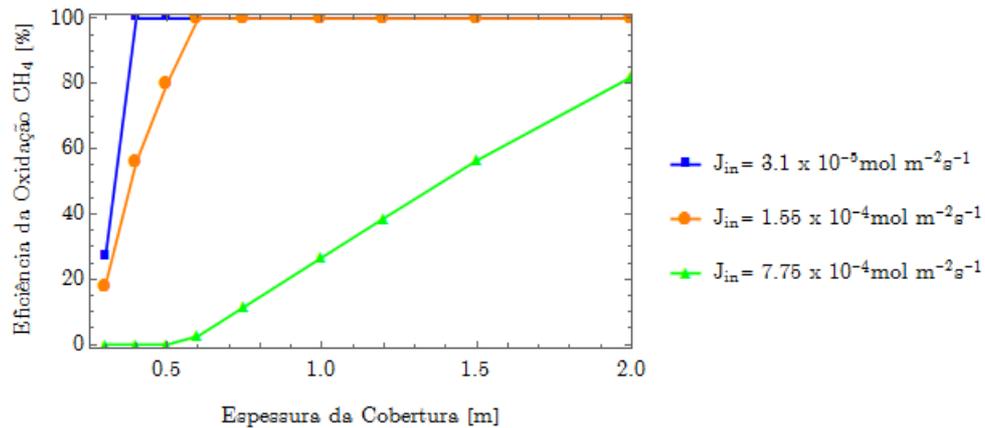


Figura 8.29 – Eficiência da oxidação para diferentes espessuras da cobertura e  $J_{in}$  em  $t = 28$  dias e com as seguintes propriedades:  $V_{máx} = 2.32 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ .

Além da espessura da cobertura, torna-se interessante conhecer o comportamento da eficiência da oxidação ao longo da profundidade com diferentes valores de taxa de produção do CH<sub>4</sub>. Dessa forma, a Figura 8.30, utilizando os valores de  $V_{máx} = 1 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$  e  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$  e uma espessura da camada de 0.5m, tem-se a dependência da eficiência da oxidação. Nota-se que para o menor valor de taxa de produção tem-se um total consumo do CH<sub>4</sub> em torno de 0.25 m. Já para os outros dois casos, a eficiência da oxidação aumenta a partir da profundidade de 0.2 m, mostrando que a oxidação do metano somente ocorre em camadas mais superficiais.

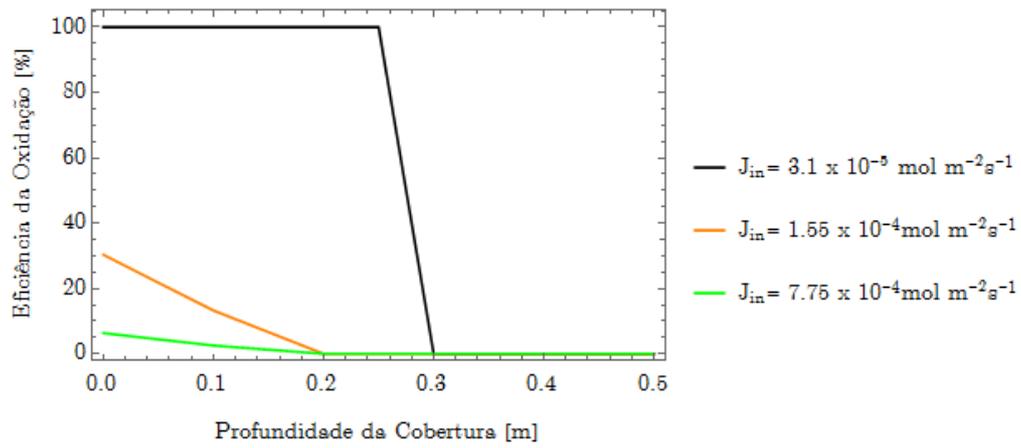


Figura 8.30 – Eficiência da oxidação em  $z$  com espessura de  $L = 0.5\text{m}$ , diferentes  $J_{in}$  em  $t = 28$  dias e propriedades do solo:  $V_{m\acute{a}x} = 1 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$  e  $K_{CH_4} = 6.6 \times 10^{-3}$ .

## 9. CONCLUSÕES

A vantagem de se obter um modelo analítico da equação de transporte de gases é fornecer ferramentas que facilitam a validação paramétrica e validação das abordagens numéricas, permitindo-se uma comparação entre ambos os métodos. Além disso, a obtenção de um modelo analítico permite a otimização de ensaios laboratoriais e de campo. Assim, a otimização do procedimento para obtenção de uma solução analítica pioneira foi desenvolvida para o entendimento do transporte de gases em meio poroso não saturado de grande interesse para locais como aterros sanitários.

Dessa forma, foi proposto uma solução analítica fundamentada na Equação Advecção-Dispersão (ADE) com a inserção do termo de ordem zero. A inserção desse, deve-se ao processo de oxidação do metano que pode ocorrer nas camadas de cobertura de aterros sanitários. Além disso, na equação desenvolvida considerou-se toda a influência (espacial e temporal) que a temperatura e variação das concentrações dos gases têm sobre o coeficiente de difusão molecular, viscosidade e na oxidação do metano.

O modelo foi desenvolvido e solucionado analiticamente contando com um novo desenvolvimento matemático o qual permite a compreensão de como a solubilidade dos gases em água pode afetar o transporte desses. Contudo, novos estudos são requeridos para analisar como os efeitos do processo de infiltração podem afetar o transporte dos gases. Isso porque, em camadas de coberturas convencionais de aterros sanitários o processo de infiltração pode vir a ocorrer.

A validação do novo modelo proposto mostrou-se eficiente para a simulação dos gases metano ( $\text{CH}_4$ ) e oxigênio ( $\text{O}_2$ ), porém encontrou-se divergências nos valores do dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) e nitrogênio ( $\text{N}_2$ ). Discute-se nessa pesquisa que tais

divergências estão relacionadas ao consumo de  $\text{CH}_4$  devido a oxidação e a geração desse em  $\text{CO}_2$ . Assim, maiores valores de  $\text{CO}_2$  afetaram a fração molar dos gases, afetando a fração molar do  $\text{N}_2$  de forma considerável. Portanto, devido a essa divergência, uma validação por meio do fluxo de metano emitido no topo da camada de cobertura analisada foi, também, realizada. Essa mostrou-se totalmente satisfatória evidenciando a relevância do método e a necessidade de uma maior aprofundamento do comportamento do  $\text{CO}_2$  e  $\text{N}_2$ .

As análises paramétricas mostraram a eficiência da oxidação do metano ( $O_{ef}$ ) sob diferentes perspectivas. Assim, viu-se a necessidade que se há em obter de forma satisfatória os valores de  $V_{máx}$  e  $K_{\text{CH}_4}$ , pois ambos afetam de forma considerável a eficiência de oxidação. Além disso, as análises da espessura da camada de cobertura ( $L$ ) e do fluxo de biogás gerado pelo RSU ( $J_{in}$ ) mostram de forma relevante como ambos comportam-se quando varia-se  $V_{máx}$ . Dessa forma, observou-se que o valor de  $V_{máx}$  torna-se um importante valor na hora da execução das camadas de cobertura de aterros sanitários.

Por fim, o modelo proposto evidenciou a importância do desenvolvimento de uma solução analítica do transporte de gases em que considere também a oxidação do metano e a variação das propriedades dos gases. Assim, a solução proposta permite que análises paramétricas sejam realizadas e comparações entre os métodos numéricos existentes.

## 9.1 Sugestões para pesquisas futuras

Faz-se as seguintes sugestões para aprimoramento da pesquisa já desenvolvida:

- ✓ Fazer um estudo experimental aprofundado para comparação com os resultados obtidos por meio da solução analítica em solos brasileiros usados comumente como cobertura de aterro sanitário, objetivando uma análise aprofundada, principalmente, do comportamento do  $\text{CO}_2$  e  $\text{N}_2$  que tiveram maior discrepância com valores do ensaio utilizado nessa pesquisa;
- ✓ Acoplar à equação desenvolvida o processo de infiltração de água, permitindo, assim, uma análise do comportamento dos gases e da eficiência da oxidação do metano quando se há precipitações;
- ✓ Fazer um estudo experimental simultâneo do transporte de gases e o processo de infiltração para comparação com os resultados obtidos por meio da solução analítica acoplada com o processo de infiltração;
- ✓ Fazer um estudo experimental aprofundado para obtenção de valores de  $V_{m\acute{a}x}$  e  $K_{\text{CH}_4}$  em solos brasileiros usados comumente como cobertura de aterro sanitário.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abichou, T., Mahieu, K., Chanton, J., Romdhane, M., & Mansouri, I. (2011). Scaling methane oxidation : From laboratory incubation experiments to landfill cover field conditions. *Waste Management*, 31(5), 978–986.
- Albrecht, B. B. A., & Benson, H. (2001). Effect of Desiccation on Compacted Natural Clays. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 127(1), 67–75.
- Alonso, E. E., Gens, A., & Hight, D. (1987). Special Problem Soils . General Report . In Proceedings of the 9th European Conference of Soil Mechanics and Foundation Engineering, 3(June 2017), 1087–1146.
- Bear, J., & Cheng, A. H.-D. (2010). *Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport* (Vol. 23). New York, NY. USA.: Springer, 834p.
- Berg, J. M., Tymoczko, J. L., & Stryer, L. (2002). *Biochemistry* (5th ed.). New York: W H Freeman, 394p.
- Bian, R., Xin, D., & Chai, X. (2018). A Simulation model for estimating methane oxidation and emission from landfill cover soils. *Waste Management*, 77, 426–434.
- Binning, P. J., Postma, D., Russell, T. F., Wesselingh, J. A., & Boulin, P. F. (2007). Advective and diffusive contributions to reactive gas transport during pyrite oxidation in the unsaturated zone. *Water Resources Research*, 43(2), 1–12.
- Brooks, R. H., & Corey, A. T. (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Paper*, (3), 27.
- Buckingham, E. (1907). Studies on the Movement of Soil Moisture. *Bureau of Soils - Bulletin No. 38*, 61.
- Camapum de Carvalho, J., Gitirana, G. de F. N., Machado, S. L., Mascarenha, M. M. dos A., & Chagas, F. da S. (2015). *Solos não saturados no contexto geotécnico*. ABMS, São Paulo, SP, 759p.
- Catapreta, C. A. A. (2008). *Comportamento de um aterro sanitário experimental: avaliação da influência do projeto, construção e operação*. Belo Horizonte: UFMG. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Minas Gerais, 316p.
- Cavalcante, A. L. B., & Zornberg, J. G. (2017). Efficient Approach to Solving Transient Unsaturated Flow Problems. I: Analytical Solutions. *International Journal of Geomechanics*, 1–17.
- CETESB, C. A. do E. de S. P. (2019). Biogás. Retrieved from <https://cetesb.sp.gov.br/biogas/>
- Chanton, J. P., Powelson, D. K., & Green, R. B. (2009). Methane oxidation in landfill

- soils, is a 10% default value reasonable? *Journal of Environmental Quality*, 38(2), 654–663.
- Chung, T.-H., Ajlan, M., Lee, L. L., & Starling, K. E. (1988). Generalized Multiparameter Correlation for Nonpolar and Polar Fluid Transport Properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 27(4), 671–679.
- Costa, M. D. (2015). *Estudos De Camadas de Cobertura de Aterros Sanitários em Colunas De Solos*. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Pernambuco, 144p.
- Cussler, E. . L. . (1984). *Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems* (3rd ed.). Cambridge University Press, New York, NY, 631p.
- De Visscher, A., Thomas, D., Boeckx, P., & Van Cleemput, O. (1999). Methane oxidation in simulated landfill cover soil environments. *Environmental Science and Technology*, 33(11), 1854–1859.
- De Visscher, A., & Van Cleemput, O. (2003). Simulation model for gas diffusion and methane oxidation in landfill cover soils. *Waste Management*, 23(7), 581–591.
- Edlefsen, N. E., & Anderson, A. B. C. (1943). Edlefsen Anderson 1943 Hilgardia. *Hilgardia: Journal of Agricultural Science Published by the California Agricultural Experiment Station*, 15(2), 31–298.
- El-Fadel, M., Findikakis, A. N., & Leckie, J. O. (1989). A numerical model for methane production in managed sanitary landfills. *Waste Management & Research*, 7(1), 31–42.
- Elberling, B., Nicholson, R. V., & Scharer, J. M. (1994). A combined kinetic and diffusion model for pyrite oxidation in tailings: a change in controls with time. *Journal of Hydrology*, 157(1–4), 47–60.
- Fairbanks, D. F., & Wilke, C. R. (1950). Diffusion Coefficients in Multicomponent Gas Mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry*, 42(3), 471–475.
- Feng, S., Ng, C. W. W., Leung, A. K., & Liu, H. W. (2017). Numerical modelling of methane oxidation efficiency and coupled water-gas-heat reactive transfer in a sloping landfill cover. *Waste Management*, 68, 355–368.
- Fourie, A. B., & Moonsammy, M. (2002). Store and release covers for landfills in semi-arid climates. *Unsaturated Soils*, 823–826.
- Fredlund, D. G., & Rahardjo, H. (1993). *Soil Mechanics for Unsaturated Soils*. JOHN WILEY & SONS, INC., 507p.
- Fredlund, D. G., & Xing, A. (1994). Equations for the soil-water characteristic curve. *Canadian Geotechnical Journal*, 31(3), 521–532.

- Fuller, E. N., Schettler, P. D., & Giddings, J. C. (1966). A new method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. *Industrial and Engineering Chemistry*, 58(5), 18–27.
- Gardner, W. R. (1958). Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. *Soil Science Society of America Journal*, 85(4), 228–232.
- Garg, A., & Achari, G. (2010). A Comprehensive Numerical Model Simulating Gas, Heat, and Moisture Transport in Sanitary Landfills and Methane Oxidation in Final Covers. *Environmental Modeling and Assessment*, 15(5), 397–410.
- Gebert, J., Röwer, I. U., Scharff, H., Roncato, C. D. L., & Cabral, A. R. (2011). Can soil gas profiles be used to assess microbial CH<sub>4</sub> oxidation in landfill covers? *Waste Management*, 31(5), 987–994.
- Guan, C., Xie, H. jian, Qiu, Z. hong, Chen, Y. min, & Chen, P. xiong. (2016). One-dimensional coupled model for landfill gas and water transport in layered unsaturated soil cover systems. *Journal of Zhejiang University: Science A*, 17(8), 667–676.
- Ho, C. K., & Webb, S. W. (2000). *Theory and Applications of Transport in Porous Media*. (C. K. Ho & S. W. Webb, Eds.) *Journal of Fluid Mechanics* (Vol. 418). Springer, 446p.
- IPCC. (2006). CHAPTER 4. In J. N. Carras, P. M. Franklin, Y. Hu, A. K. Singh, O. V. Tailakov, D. Picard, ... I. Yesserkepova (Eds.), *Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories* (p. 78).
- Kjeldsen, P., Dalager, A., & Broholm, K. (1997). Attenuation of methane and nonmethane organic compounds in landfill gas affected soils. *Journal of the Air and Waste Management Association*, 47(12), 1268–1275.
- Krishna, R., & Wesselingh, J. A. (1997). The Maxwell-Stefan approach to mass transfer. *Chemical Engineering Science*, 52(6), 861–911.
- Lam, L., Fredlund, D. G., & Barbour, S. L. (1987). Transient seepage model for saturated-unsaturated soil systems: a geotechnical engineering approach. *Canadian Geotechnical Journal*, 24(4), 565–580. <http://doi.org/10.1139/t87-071>
- Lu, N., & Likos, W. . (2004). *Unsaturated Soil Mechanics*. John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 584p.
- Maldaner, L. e S. (2011). *Cobertura para oxidação biológica do metano em aterros de resíduos sólidos urbanos*. Dissertação de Mestrado. Escola Politécnica da

- Universidade de São Paulo, 108p.
- Mariano, M. O. H. (2008). *Avaliação da retenção de gases em camadas de cobertura de aterro de resíduos sólido*. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Pernambuco, 243p.
- Mason, E. A., & Malinauskas, A. P. (1983). *Gas transport in porous media : The dusty-gas model*. Amsterdam: Elsevier, New York, NY, 194p.
- Masrouri, F., Bicalho, K. V., & Kawai, K. (2008). Laboratory hydraulic testing in unsaturated soils. *Laboratory and Field Testing of Unsaturated Soils*, 26(6), 691–704.
- Mccartney, J., & Zornberg, J. G. (2004). Use of Moisture Profiles and Lysimetry to Assess Evapotranspirative Cover Performance. In *5th International PhD Symposium in Civil Engineering* (Vol. 1, pp. 961–969).
- Melchior, S. (1997). In situ studies of the performance of landfill caps (compacted soil liners, geomembranes, geosynthetic clay liners, capillary barriers). *Land Contamination and Reclamation*, 5(3), 209–216.
- Metcalfe, D., & Farquhar, G. J. (1987). Modeling Gas Migration Through Unsaturated Soils from Waste Disposal Sites. *Water, Air, and Soil Pollution*, 32(1984), 247–259.
- Millington, R. J. (1959). Gas diffusion in porous media. *Science*, 130, 100–103.
- Molins, S., & Mayer, K. U. (2007). Coupling between geochemical reactions and multicomponent gas and solute transport in unsaturated media: A reactive transport modeling study. *Water Resources Research*, 43(5), 1–16.
- Molins, S., Mayer, K. U., Scheutz, C., & Kjeldsen, P. (2008). Transport and reaction processes affecting the attenuation of landfill gas in cover soils. *Journal of Environmental Quality*, 37(2), 459–468.
- Mualem, Y. (1976). A new model for predicting the hydraulic conduc. *Water Resources Research*, 12(3), 513–522.
- Neufeld, P. D., Janzen, A. R., & Aziz, R. A. (1972). Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals (1,8)\* for the lennard-jones (12-6) potential. *The Journal of Chemical Physics*, 57(3), 1100–1102.
- Ng, C. W.W., Feng, S., & Liu, H. W. (2015). A fully coupled model for water-gas-heat reactive transport with methane oxidation in landfill covers. *Science of the Total Environment*, 508, 307–319.
- Ng, C. W.W., & Shi, Q. (1998). Influence of rainfall intensity and duration on slope

- stability in unsaturated soils. *Quarterly Journal of Engineering Geology*, 31(2), 105–113.
- Ng, Charles W. W., & Menzies, B. (2007). *Advanced Unsaturated Soil Mechanics and Engineering*. Taylor & Francis, 687p.
- Parker, J. C. (1989). Multiphase Flow and Transport in Porous Media. *Reviews of Geophysics*, 27(3), 311–328.
- Pedott, J. G. J., & Aguiar, A. D. O. e. (2014). Biogás Em Aterros Sanitários: Comparando a Geração Estimada Com a Quantidade Validada Em Projetos De Mecanismo De Desenvolvimento Limpo. *Holos*, 4(December), 195.
- Pratt, C., Walcroft, A. S., Deslippe, J., & Tate, K. R. (2013). CH<sub>4</sub> /CO<sub>2</sub> ratios indicate highly efficient methane oxidation by a pumice landfill cover-soil. *Waste Management*, 33(2), 412–419.
- Reid, R. C., Prausnitz, J. M., & Poling, B. E. (1987). *The Properties of Gases and Liquids* (4th ed.). New York, NY, USA.: McGraw-Hill, Inc., 741p.
- Ribeiro, F., & Lima, C. (2000). COLETA SELETIVA DE LIXO DOMICILIAR - ESTUDO DE CASOS. *CAMINHOS DE GEOGRAFIA*, 1(2), 50–69.
- Roncato, C. D. L., & Cabral, A. R. (2012). Evaluation of methane oxidation efficiency of two biocovers: Field and laboratory results. *Journal of Environmental Engineering*, 138(2), 164–173.
- Scheutz, C., Bogner, J., Chanton, J., Blake, D., Morcet, M., & Kjeldsen, P. (2003). Comparative Oxidation and Net Emissions of Methane and Selected Non-Methane Organic Compounds in Landfill Cover Soils. *Environmental Science and Technology*, 37(22), 5150–5158.
- Scheutz, C., Kjeldsen, P., Bogner, J. E., De Visscher, A., Gebert, J., Hilger, H. A., ... Spokas, K. (2009). Microbial methane oxidation processes and technologies for mitigation of landfill gas emissions. *Waste Management and Research*, 27(5), 409–455.
- Teixeira, P. F. (2008). *Oxidação Biológica do Metano em Coberturas de Aterros de Resíduos Sólidos Urbanos : Dinâmica do Processo e Aspectos Geotécnicos*. Tese de Doutorado. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 167p.
- Townsend, T. G., Wise, W. R., & Jain, P. (2005). One-dimensional gas flow model for horizontal gas collection systems at municipal solid waste landfills. *Journal of Environmental Engineering*, 131(12), 1716–1723.
- UNFCCC. (2012). ACM0001 Large-scale Consolidated Methodology: Flaring or use of

- landfill gas Version 15.0, 1–37.
- USEPA. Evapotranspiration landfill cover system fact sheet, Pub. L. No. EPA 542-F-03-015 (2003). USA - Washington, 12p.
- USEPA. (2005). Landfill Gas Emissions Model (LandGEM) user's guide. U.S. Environmental Protection Agency, 48p.
- Van Genuchten, M. Th., & Alves, W. J. (1982). Analytical Solutions of the One Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation. *United States Department of Agriculture Technical Bulletin*, 149.
- Van Genuchten, M.Th. (1980). A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5), 892–898.
- Van Genuchten, Martinus Th, Leij, F. J., Skaggs, T. H., Toride, N., Bradford, S. A., & Pontedeiro, E. M. (2013). Exact analytical solutions for contaminant transport in rivers 1. The equilibrium advection-dispersion equation. *Journal of Hydrology and Hydromechanics*, 61(2), 146–160.
- Vanapalli, S. K., Fredlund, D. G., & Pufahl, D. E. (1999). Influence of soil structure and stress history on the soil-water characteristics of a compacted till. *Geotechnique*, 49(2), 143–159.
- Wilken, D., Strippel, F., Hofmann, F., Maciejczyk, M., Klinkmüller, L., Wagner, L., ... Findeisen, C. (2017). *Biogas to Biomethane: flexible energy supply from biomass*. (F. B. e. V. Authors, Ed.). Freising - Germany: Fachverband Biogas e. V, 68p.
- Xie, T., Wang, C., Reddy, K. R., & Yaghoubi, P. (2012). Modeling of Methane Migration and Oxidation in Biochar- amended Landfill Cover Soil. In *the 106th Annual Conference & Exhibition, Air & Waste Management Association* (pp. 1–17).
- Yao, Y., Su, Y., Wu, Y., Liu, W., & He, R. (2015). An analytical model for estimating the reduction of methane emission through landfill cover soils by methane oxidation. *Journal of Hazardous Materials*, 283, 871–879.

## APÊNDICE A: DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO DA ADE PARA GASES

Pode-se descrever a variação da concentração molar de um gás, a partir da conservação de massa do gás nas fases líquidas e gasosa. Assim, primeiramente, substitui-se as Eqs. (4.4), (4.5), (4.6) e (4.15) na Eq. (4.17), obtendo-se:

$$J_z = \theta_a v_{r,za} c_a^m + \theta_w v_{r,zw} c_w^m - \theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} \quad (\text{A.1})$$

Obtendo-se o fluxo de massa na direção  $z$  ( $J_z$ ) e substituindo a Eq. (A.1) na Eq. (4.16), encontra-se:

$$\frac{\partial [\theta_w c_w^m + \theta_a c_a^m]}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_a v_{r,za} c_a^m + \theta_w v_{r,zw} c_w^m - \theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} \right] \pm \rho_d r_m \quad (\text{A.2})$$

Reorganizando a Eq. (A.2) de forma a separar os termos de acordo com a parcela dos mecanismos responsáveis pelo transporte do gás  $m$  na fase gasosa e os responsáveis pelo transporte do gás  $m$  solubilizado em água, tem-se:

$$\frac{\partial [\theta_w c_w^m + \theta_a c_a^m]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} - \theta_a v_{r,za} c_a^m \right] - \frac{\partial}{\partial z} [\theta_w v_{r,zw} c_w^m] \pm \rho_d r_m \quad (\text{A.3})$$

Por fim, considerando a Lei de Henry, Eq. (4.9), pode-se rescrever a Eq. (A.3) na forma geral da ADE para gases:

$$\frac{\partial [R_m \theta_a c_a^m]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} - \theta_a v_{r,za} c_a^m \right] - \frac{\partial}{\partial z} [\theta_w v_{r,zw} H^m c_a^m] \pm \rho_d r_m \quad (\text{A.4})$$

além disso,

$$c_t^m = \theta_w H^m c_a^m + \theta_a c_a^m \quad (\text{A.5})$$

ou ainda,

$$c_t^m = R_m \theta_a c_a^m \quad (\text{A.6})$$

onde,

$$R_m = 1 + \frac{\theta_w H^m}{\theta_a} \quad (\text{A.7})$$

$R_m =$  pode ser considerado como fator de retardamento do gás  $m$  [Adimensional].

## APÊNDICE B: SIMPLIFICAÇÃO DA ADE PARA GASES

A equação que descreve o transporte de gases em um meio poroso não saturado pode ser descrita por:

$$\frac{\partial [R_m \theta_a c_a^m]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} - \theta_a v_{r,za} c_a^m \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_w v_{r,zw} H^m c_a^m \right] \pm \rho_d r_m \quad (\text{B.1})$$

Devido à alta não linearidade dessa equação, simplificações são necessárias para que seja possível resolvê-la analiticamente. Portanto, uma maneira de simplificá-la é considerando que o teor de umidade volumétrica do ar ( $\theta_a$ ) seja constante. Dessa forma, é importante relembrar a seguinte relação:

$$\theta_a + \theta_w = \theta_s \quad (\text{B.2})$$

Assim, a simplificação mencionada torna-se razoável em duas ocasiões:

(a) a umidade do solo não varia ao longo do tempo, ocasionando que o teor de umidade volumétrica da água ( $\theta_w$ ) também seja constante e ,portanto,  $\theta_a$  torna-se:

$$\theta_a = \theta_s - \theta_w \quad (\text{B.3})$$

(b) nos casos onde haja variação da umidade, ou seja, onde haja infiltração de água no solo, a variação de  $\theta_w$  seja resolvida de forma acoplada à equação do transporte de gases. Assim,  $\theta_a$  pode ser considerado uma constante, porém, variando no tempo e no espaço, sendo obtida por:

$$\theta_a(z, t) = \theta_s - \theta_w(z, t) \quad (\text{B.4})$$

Dessa forma, a Eq. (B.1), considerando a simplificação de que  $\theta_a$  seja constante, torna-se:

$$R_m \theta_a \frac{\partial c_a^m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_a D_a^{m,ef} \frac{\partial c_a^m}{\partial z} - \theta_a v_{r,za} c_a^m \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta_w v_{r,zw} H^m c_a^m \right] \pm \rho_d r_m \quad (\text{B.5})$$

Dividindo-se toda a equação acima por  $\theta_a$  e rearranjando todos os termos encontra-se:

$$R_m \frac{\partial c_a^m}{\partial t} = D_a^{m,ef} \frac{\partial^2 c_a^m}{\partial z^2} - \left[ v_{r,za} + \frac{\theta_w}{\theta_a} v_{r,zw} H^m \right] \frac{\partial c_a^m}{\partial z} \pm \frac{\rho_d r_m}{\theta_a} \quad (\text{B.6})$$

Por fim, considerando a Eq. (B.2), reescreve-se a Eq. (B.6) da seguinte forma:

$$R_m \frac{\partial c_a^m}{\partial t} = D_a^{m,ef} \frac{\partial^2 c_a^m}{\partial z^2} - \left[ v_{r,za} + \frac{(\theta_s - \theta_a)}{\theta_a} v_{r,zw} H^m \right] \frac{\partial c_a^m}{\partial z} \pm \gamma^m \quad (\text{B.7})$$

onde,

$$\gamma^m = \frac{\rho_d r_m}{\theta_a} \quad (\text{B.8})$$