

## Modelagem matemática e simulação numérica do processo de troca iônica aplicado à remoção de $\text{Cr}^{+6}$ de efluentes galvânicos

Mauro Edson da Silva Júnior  
131ª Defesa - 11 de março de 2022

### Membros da Banca Examinadora:

Prof. Dr. André Lourenço Nogueira (Orientador/UNIVILLE)  
Profa. Dra. Noeli Sellin (Coorientadora/UNIVILLE)  
Profa. Dra. Indianara Conceição Ostroski (UFG)  
Prof. Dr. Ozair Souza (UNIVILLE)

### RESUMO:

A água é um dos recursos naturais essenciais para o desenvolvimento da sociedade, devido sua aplicação na agricultura, geração de energia, saneamento básico, saúde humana e como matéria-prima para processos industriais. Durante os processos que participa, adquire contaminantes, os quais devem ser removidos antes de sua devolução aos corpos hídricos. Dentre os contaminantes, o  $\text{Cr}^{+6}$  merece atenção especial devido à sua elevada toxicidade e aos efeitos adversos que pode ocasionar ao organismo humano. Assim, a investigação de processos e tecnologias aplicadas à sua remoção torna-se um assunto de extrema importância. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi realizar a modelagem matemática e a simulação numérica de um sistema de troca iônica aplicado à remoção de  $\text{Cr}^{+6}$  de efluentes galvânicos, empregando modelos capazes de prever o equilíbrio termodinâmico e a cinética em leito fixo. Para isto, coletou-se dados experimentais para o equilíbrio termodinâmico em batelada para as resinas aniônicas PFA300 e SSTPFA63. Os dados experimentais de equilíbrio foram ajustados à modelos de equilíbrio de fases, isotermas de Langmuir e Freundlich, e à modelos de Lei de Ação das Massas (LAM). De modo a aprimorar a previsão da LAM, incluiu-se os efeitos das não idealidades das fases, empregando o modelo de Bromley para o cálculo do coeficiente de atividade na fase líquida, e o modelo de Wilson para cálculo do coeficiente de atividade na fase sólida. A cinética em leito fixo foi representada por um modelo fenomenológico de transporte dispersivo, considerando os efeitos de transferência de massa, dispersão e equilíbrio termodinâmico na interface sólido-líquido. O modelo foi resolvido empregando o método das linhas, com auxílio da biblioteca numérica odeint para resolução das equações diferenciais ordinárias (ODE) resultantes da discretização espacial. A difusividade do  $\text{HCrO}_4^-$  nas resinas de troca iônica foi determinada por testes cinéticos em batelada, resultando em valores de  $1,89 \times 10^{-11}$  e  $1,68 \times 10^{-11}$   $\text{m}^2/\text{s}$  para as resinas PFA300 e SSTPFA63, respectivamente. Os dados obtidos do ajuste dos modelos termodinâmicos demonstram perfil de isoterma extremamente favorável para remoção do  $\text{HCrO}_4^-$ . A inclusão das não idealidades no modelo da LAM melhorou a representação dos dados de equilíbrio, sendo a maior fonte de não idealidades atribuída à fase sólida. Os testes cinéticos em batelada demonstraram rápida remoção do  $\text{HCrO}_4^-$ , atingindo 92% da remoção após 20 min e 99% de remoção após 45 min de agitação. Referente ao perfil das curvas de ruptura, o modelo fenomenológico representou de maneira adequada o comportamento cinético em leito fixo. O erro de previsão para o tempo de ruptura ( $t_b$ ) foi de 1,23%, -3,73%, -1,97% e 0,85% para 4 condições experimentais diferentes, e abaixo de 10% para parâmetros importantes referentes ao leito fixo (razão de uso do leito,  $t_{50}$ , altura útil de resina, etc), comprovando a eficácia do modelo. De forma geral, o modelo fenomenológico de transporte dispersivo foi adequado para representar a cinética em leito fixo.

**Palavras-chave:** Lei de Ação das Massas. Transporte dispersivo. Volumes finitos. Purolite. Leito fixo. Bicromato. Resinas aniônicas.