



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA - UFSC
DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA E ESTATÍSTICAS - INE
GRADUAÇÃO EM SISTEMAS DE INFORMAÇÃO

Trabalho de implementação

Disciplina: Desenvolvimento de Sistemas Orientados a Objetos I
(INE5605-02238B)

Professor(a): Thais Bardini Idalinoi, PhD

Aluno(a): Djulyan Tavella Mendes (24207006)
Aluno(a): Jonathan Tenório de Lima (25102233)
Período: 2025.2

Sumário

1	Introdução	2
2	Fundamentação Teórica: Eletrocinética em 1D	2
2.1	Modelo numérico	3
2.2	Experimentos em laboratório	4
3	Requisitos de projetos	4
4	Projeto com UML e MVC	7
5	Restrições	8
6	Considerações finais	8
	Referências	8

1 Introdução

2 Fundamentação Teórica: Eletrocinética em 1D

Os meios porosos são complexos sistemas multifásicos - podendo conter sólidos, líquidos e gases - onde operam diversos fenômenos de transporte. Um meio poroso natural bastante conhecido é o solo. Formado a partir das rochas, o solo perde a cimentação natural, oriunda do processo de cristalização do magma, mas mantém coesos os minerais secundários remanescentes. Os vazios entre os sólidos do solo geralmente são preenchidos por água e ar, no entanto, podem ocorrer a presença de contaminantes (metais pesados e compostos orgânicos, por exemplo) e microrganismos (vírus, bactérias e fungos). Esses vazios são também denominados interstícios e a água que o ocupa é muitas vezes chamada de água intersticial. A água no interior dos poros movimenta-se naturalmente devido a ação da gravidade e da pressão, ou seja, sob o efeito de um gradiente hidráulico. A Lei de Darcy descreve o fluxo de água como na equação 1.

$$q_h = -k_h \frac{\partial h}{\partial x} \quad (1)$$

Em que, q_h é a vazão [$L \cdot T^{-1}$], k_h é a condutividade hidráulica [$L \cdot T^{-1}$], h é a carga hidráulica entre dois pontos [L], x representa o deslocamento [L]. A água do solo também pode ser mobilizada pela ação de um campo elétrico, em um fenômeno denominado eletroosmose (electro-osmosis), representado pela equação 2.

$$q_e = -k_e \frac{\partial E}{\partial x} \quad (2)$$

Onde, q_e é o fluxo eletro-osmótico [$L \cdot T^{-1}$], k_e é a permeabilidade eletro-osmótica [$L^2 \cdot V^{-1} \cdot T^{-1}$] e E é o potencial elétrico (V). Sob a ação de um gradiente de concentração, ocorre também o fenômeno de difusão, representado na equação 3.

$$q_D = -nD_i \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3)$$

Em que, q_D é o fluxo de massa [$M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}$], D_i é o coeficiente de difusão [$L^2 \cdot T^{-1}$], C_i é a concentração [$M \cdot L^{-3}$] da espécie química i no tempo t e x representa o espaço [L].

O gradiente elétrico induz o movimento das espécies ionizadas dissolvidas na água intersticial do solo, em um fenômeno de transporte eletroquímico de massa conhecido como eletro-migração ou migração iônica (equação 4).

$$q_{em} = -u_i C_i \frac{\partial E}{\partial x} \quad (4)$$

Na equação 4, q_{em} é o fluxo de massa por migração iônica [$L \cdot T^{-1}$]. O sentido da migração iônica é orientado pela polaridade da espécie química e o sentido do campo

elétrico. Geralmente, nos ensaios, é definido um eletrodo positivo na porção esquerda, denominado anodo, e um eletrodo negativo, na porção direita da célula, chamado catodo. Os cátions migram do anodo para o catodo, enquanto os ânions movem-se no sentido contrário, do catodo para o anodo.

As espécies químicas também podem interagir com os sólidos do solo, sendo “retidas” através de uma série de reações de sorção. O modelo linear de adsorção é bastante utilizado para representar essas reações e é representado pela equação 5.

$$\frac{\partial S_i}{\partial t} = \frac{\rho_b K_d}{n} \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (5)$$

Na equação 5, ρ_b é a massa específica seca do solo [$M.M^{-1}$], K_d é o coeficiente de distribuição [$L^3.M^{-1}$] e n é a porosidade do solo [-]. Assumindo equilíbrio químico e de carga e, então, aplicando a lei de conservação da massa, obtém-se a equação 6 que representa o transporte de massa ao longo do solo para a condição de fluxo unidimensional.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + (u_i + k_e) \frac{\partial E}{\partial x} \frac{\partial C_i}{\partial x} + k_h \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial C_i}{\partial x} - \frac{\partial S_i}{\partial t} \quad (6)$$

Substituindo a equação 5 na equação 6, obtém-se:

$$\left(\frac{\rho_b K_d}{n} + 1 \right) \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + (u_i + k_e) \frac{\partial E}{\partial x} \frac{\partial C_i}{\partial x} + k_h \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial C_i}{\partial x} \quad (7)$$

O termo entre parênteses na equação 7 é denominado *coeficiente de retardamento* e representa numericamente o atraso na passagem do contaminante através de uma coluna (ou camada) de solo.

Para uma revisão mais detalhada dessas equações é sugerido que o leitor consulte o livro *Contaminant Hydrogeology* (1) e o artigo científico *Removal of contaminants from soils by electrokinetics: A theoretical treatise* Alshawabkeh e Acar (1992) (2).

2.1 Modelo numérico

Existem muitas formas de encontrar uma solução para uma equação diferencial parcial como aquela representada em 7. Por se tratar de uma equação não linear, os métodos analíticos tendem a ser bastante complexos e, muitas vezes, não permitem obter uma solução exata. Neste trabalho, os autores optaram por utilizar o Método das Diferenças Finitas (MDF), uma estratégia simples e amplamente empregada em problemas semelhantes. O leitor encontrará uma referência rica e detalhada em Smith (1985) (3).

A equação 7 pode ser representada em um esquema de diferenças finitas como mostrado na equação 8.

$$\frac{C_j^i - C_j^{i-1}}{\delta_t} = \frac{D_e}{R_f} \frac{(C_{j+1}^{i-1} - 2C_j^{i-1} + C_{j-1}^{i-1})}{\delta_x^2} + \frac{(u_i + k_e) i_e}{R_f} \frac{(C_{j+1}^{i-1} - C_{j-1}^{i-1})}{2\delta_x} + \frac{k_h i_h}{R_f} \frac{(C_{j+1}^{i-1} - C_{j-1}^{i-1})}{2\delta_x} \quad (8)$$

Para obter a equação 8 foi admitido que os gradientes elétrico (i_e) e hidráulico (i_h) são constantes ao longo de um extrato de solo sendo experimentado numa célula eletrocinética, como será apresentado mais adiante. Embora, na prática, ambos gradientes variem no tempo e espaço, para condições experimentais controladas essa variação é pequena o suficiente para ser desprezada aqui. Os índices i e j representam, respectivamente, as posições de uma matriz de valores no **tempo** (linhas) e **espaço** (colunas).

A equação 8 pode ser rearranjada da forma a seguir:

$$C_j^i = C_{j+1}^{i-1}(p + r + s) - 2pC_j^{i-1} + C_{j-1}^{i-1}(p - r - s) \quad (9)$$

As constantes p , r e s na equação anterior são dadas como a seguir:

$$p = \frac{D_e}{R_f} \frac{\delta_t}{\delta_x^2} \quad (10)$$

$$r = \frac{(u_i + k_e) i_e}{R_f} \frac{\delta_t}{2\delta_x} \quad (11)$$

$$s = \frac{k_h i_h}{R_f} \frac{\delta_t}{2\delta_x} \quad (12)$$

Conforme detalha Smith (1985) (3), para que um arranjo explícito do MDF, como na equação 9, funcione corretamente e convirja é necessário que a relação $\frac{\delta_t}{\delta_x} \leq 0.5$.

A condição inicial é dada na equação 13 e as condições de contorno são definidas como na equação 14 (condição de contorno esquerda) e 15 a seguir:

$$C_j^0 = C(j) \quad (13)$$

$$C|_{j=0} = C_e \quad (14)$$

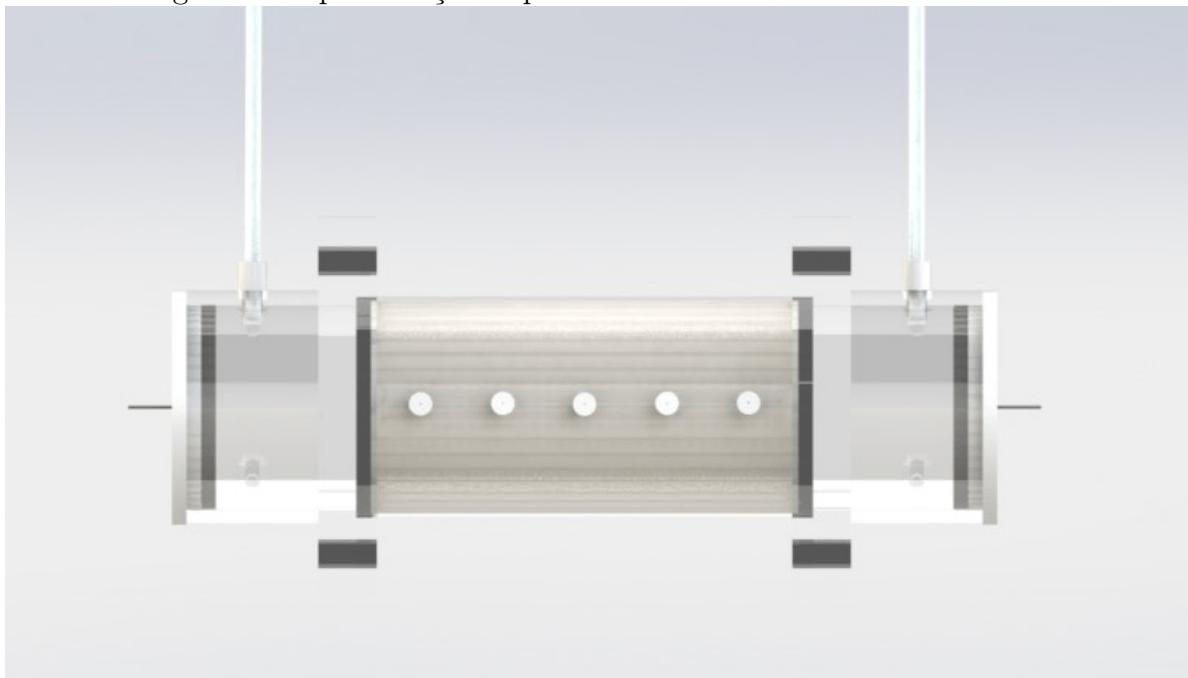
$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 - > \frac{C_n^i - C_{n-1}^i}{\delta_x} = 0 - > C_n^i = C_{n-1}^i \quad (15)$$

2.2 Experimentos em laboratório

Experimentos de laboratório são uma abordagem bastante comum para a estimativa dos parâmetros do solo. A figura 1 é uma representação de uma célula eletrocinética, muito utilizada para realizar ensaios e calcular a variação de massa sob a ação de gradientes de potenciais hidráulicos e elétricos em uma condição controlada.

3 Requisitos de projetos

Figura 1: Representação esquemática de uma célula eletrocinética.



fonte: os autores.

Tabela 1: Tabela de Requisitos do Sistema

ID	Descrição do Requisito
R001	Cadastro de Usuário O sistema deve permitir o cadastro de um novo usuário. O usuário deve inserir seu nome , email , curso e matrícula . Os usuários devem ter a possibilidade de alterar seus dados . A ficha de cadastro do usuário deve ficar armazenada em uma lista de usuários . O cadastro do usuário deve ser associado a um novo experimento/ensaio iniciado.
R002	Cadastro de Solo O sistema deve permitir o cadastro de um novo solo. A cada novo solo devem ser atribuídas suas propriedades como Descrição , tipo (ex.: árido, tropical, glacial, colapsível, expansivo, orgânico), origem , cor , textura (pedregulho, areia, silte ou argila), porosidade , massa específica , permeabilidade hidráulica e permeabilidade eletroosmótica . Devem existir métodos que permitam alterar os valores dessas propriedades. As propriedades devem ficar disponíveis para uso em outras funcionalidades, como a execução de um experimento e a geração de relatórios.
R003	Cadastro de Célula Experimental O sistema deve permitir o cadastro de uma nova célula experimental. O cadastro deve conter o seu material de fabricação e dimensões (comprimento e diâmetro) . Devem ser registrados também os experimentos realizados nela.
R004	Registro da Condição Inicial do Solo <i>Continua na próxima página...</i>

Tabela de Requisitos do Sistema (Continuação)

ID	Descrição do Requisito
	Deve ser registrada a condição inicial do solo , que compreende os valores de concentração da espécie química de interesse ao longo do seu perfil longitudinal . Esta condição será original (extraída do meio ambiente) ou uma condição artificial (gerada em laboratório).
R005	Registro das Espécies Químicas Cada espécie química cadastrada deve ser identificada com nome , fórmula química , coeficiente de difusão em diluição infinita e tipo (cátion ou ânion) . Se for um ânion, o sinal no parêntese da equação 7 torna-se negativo. A espécie química pode ser imaginada como uma classe mãe, com classes filhas para espécies inorgânicas e orgânicas . Para espécies orgânicas, é necessário definir o coeficiente de partição octanol-água , K_{ow} , ou o coeficiente de partição com respeito à fração orgânica , K_{oc} e a fração de carbono orgânico , f_{oc} (onde $K_{oc} = K_d f_{oc}$).
R006	Cadastro de Simulação O sistema deve permitir o cadastro de uma nova simulação, constituída por data , um tipo de solo e uma célula experimental , duração e valores dos gradientes de potenciais determinados . Deve incluir as espécies químicas e suas concentrações nos reservatórios anexos. A simulação parte da condição inicial, registra o perfil de concentrações ao longo do tempo, e armazena o estado final das concentrações. Devem existir simulações específicas para cada condição experimental, sendo elas: Difusão apenas ; Advecção-dispersão hidráulica apenas ; Advecção-dispersão hidráulica e elétrica . Cada tipo de simulação deve apontar para uma modelagem correta .
R007	Condições de Contorno O sistema deve gerenciar e aplicar três tipos de condições de contorno: (a) Cauchy , (b) Neumann e (c) Robin , representadas pelas equações (exemplos fornecidos no texto original): <ul style="list-style-type: none"> • $C_i _{x=0} = C_a$ • $\frac{\partial C_i}{\partial x} _{x=L} = f(t)$
R008	Classe Modelagem Deve existir uma classe Modelagem que será construída sobre uma biblioteca para a solução de problemas de fluidodinâmica computacional . Seu objetivo é resolver a equação diferencial conforme as condições de teste da simulação e as condições de contorno do problema.
R009	Geração de Relatórios Gerar um relatório completo indicando o quantitativo de das simulações em relação a seus atributos.

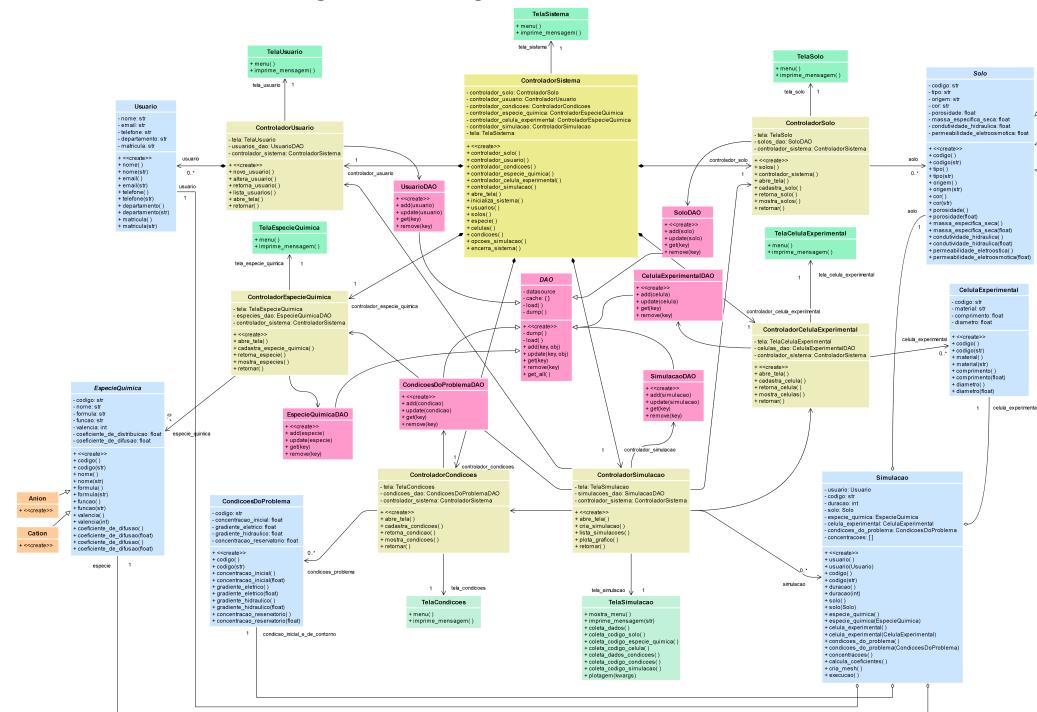
4 Projeto com UML e MVC

Tabela 2: Faixas de valores dos parâmetros utilizados e sugeridos

Parâmetro	Faixa de valores	Entrada sugerida
Condutividade hidráulica (k_h)	10^{-2} a 10^{-5} cm/h	5×10^{-3} cm/h
Permeabilidade eletro-osmótica (k_e)	10^{-1} a 10^{-3} cm ² /V.h	5×10^{-2} cm ² /V.h
Gradiente elétrico (i_e)	0 a -2 V/cm	-0.25 a -0.5 V/cm
Gradiente hidráulico (i_h)	0 a 10 cm/cm	0.0 a 0.1 cm/cm
Coeficiente de difusão (D_e)	10^{-2} a 10^{-4} cm ² /h	5×10^{-3} cm ² /h
Coeficiente de partição (K_d)	0 a 10 L/kg	0.0 a 1.5 L/kg
Porosidade (n)	0.0 a 1.0	0.3 a 0.5
Concentração inicial (C)	0 a ∞ mg/L	0.0 a 30 mg/L
Comprimento da célula (L)	5 a 1.0 cm	10 a 40 cm
Diâmetro da célula (D)	5 a 20 cm	5 a 10 cm
Duração da simulação (T)	0 a ∞ horas	24 a 120 horas
Código dos solos	arbitrária	SOLO-1xx
Código das células	arbitrária	CEL-1xx
Código das condições	arbitrária	CIC-1xx
Código das espécies químicas	arbitrária	EQ-1xx

Fonte: os autores.

Figura 2: Diagrama de classes em UML.



Fonte: os autores

5 Restrições

6 Considerações finais

Referências

- 1 FETTER, C. W.; BOVING, T.; KREAMER, D. *Contaminant Hydrogeology*. 3. ed. Long Grove, IL: Waveland Press, 2018.
- 2 ALSHAWABKEH, A. N.; ACAR, Y. B. Removal of contaminants from soils by electrokinetics: A theoretical treatise. *Journal of Environmental Science and Health. Part A: Environmental Science and Engineering and Toxicology*, v. 27, n. 7, p. 1835–1861, 1992.
- 3 SMITH, G. D. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Third. Oxford: Oxford University Press. (Oxford Applied Mathematics and Computing Science Series).