

## PROJETO CONCEITUAL

Djulyan Tavella Mendes  
Jonathan Tenório de Lima

### Descrição

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.T<sup>-1</sup>],  $k_h$  é a condutividade hidráulica [L.T<sup>-1</sup>],  $h$  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 eletro-osmose (*electro-osmosis*), representado pela equação 2.

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

Onde,  $q_e$  é o fluxo eletro-osmótico [L.T<sup>-1</sup>],  $k_e$  é a permeabilidade eletro-osmótica [L<sup>2</sup>.V<sup>-1</sup>.T<sup>-1</sup>],  $E$  é o potencial elétrico [V]. Sob o efeito de um gradiente de concentração, ocorre também o movimento da massa pelo fenômeno de difusão, representado na equação 3.

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

Em que,  $q_D$  é o fluxo de massa [M.L<sup>-2</sup>.T<sup>-1</sup>],  $D_i$  é o coeficiente de difusão [L<sup>2</sup>.T<sup>-1</sup>],  $c_i$  é a concentração da espécie química  $i$  no tempo  $t$  [M.L<sup>-3</sup>] e  $x$  representa o espaço [L].

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

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

Na equação 4,  $q_{em}$  é o fluxo de massa por migração iônica [L.T<sup>-1</sup>]. 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 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.

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

Na equação 5,  $\rho_b$  é a densidade seca do solo [M.M<sup>-1</sup>],  $K_d$  é o coeficiente de distribuição [L<sup>3</sup>.M<sup>-1</sup>] e  $n$  é a porosidade do solo [-]. Assumindo que os gradientes de potenciais são constantes e aplicando a lei de conservação da massa, obtém-se a equação 6.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} \left( 1 + \frac{\rho_b K_d}{n} \right) = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - (v_h + v_{eo}) \frac{\partial C_i}{\partial x} \quad (6)$$

Na equação anterior, o termo advectivo é uma simplificação de:

$$v_h + v_{eo} = - k_h \frac{\partial h}{\partial x} - (nk_e + u_i) \frac{\partial E}{\partial x} \quad (7)$$

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.

**Figura 1.** Esquema de uma célula eletrocinética.



O sistema de informações que será desenvolvido neste trabalho tem por objetivo simular ensaios de laboratório, resolvendo a equação 6 para cada configuração que o usuário inserir no sistema, e gerar vários tipos de relatórios convenientes.

## Requisitos

**R001:** 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. Sem que um usuário iniciar um novo experimento/ensaio, seu cadastro deve ser associado a este experimento.

**R002:** 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 eletro-osmótica. Devem existir métodos que permitam alterar os valores dessas propriedades. As propriedades devem ficar disponíveis também para que sejam utilizadas por outras funcionalidades do sistema como a execução de um experimento e a geração de relatórios.

**R003:** O sistema deve permitir o cadastro de uma nova célula experimental.

As células experimentais podem existir em diversas formas (geometrias) e materiais. O cadastro de uma nova célula deve conter o seu material de fabricação e dimensões (comprimento e diâmetro). Devem ser registrados também os experimentos realizados.

**R004:** Deve ser registrada a condição inicial do solo.

A condição inicial do solo compreende os valores de concentração da espécie química de interesse ao longo do seu perfil longitudinal. Esta condição será original em que o solo foi extraído 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 a espécie for um ânion, o sinal no interior do parêntese da equação 7 torna-se negativo. A espécie química pode ser imaginada como uma classe mãe e, assim, teremos classes filhas para representar espécies inorgânicas e espécies orgânicas. Para as espécies orgânicas é necessário definir o coeficiente de partição octanol-água,  $K_{ow}$ , ou o coeficiente de partição com respeito a fração orgânica,  $K_{oc}$  e a fração de carbono orgânico,  $f_{oc}$ . Os dois últimos dados podem ser armazenados em cada solo.

$$K_{oc} = \frac{K_d}{f_{oc}}$$

**R006:** O sistema deve permitir o cadastro de uma nova simulação.

A simulação é constituída por data, um tipo de solo e uma célula experimental, duração e valores dos gradientes de potenciais determinados. Deve incluir ainda as espécies químicas e suas concentrações nos reservatórios anexos à célula experimental. A simulação parte da condição inicial e registra o perfil de concentrações ao longo do tempo até alcançar a condição final.

A simulação aqui é equivalente a um experimento de laboratório, pois, no mundo real seria utilizada para comparar e analisar os resultados experimentais. A simulação guarda as configurações do teste e chama uma classe que realiza a modelagem dos dados. Ao final, a simulação armazena o estado final das concentrações.

Devem existir simulações específicas para cada condição experimental. No caso deste trabalho, será possível executar três tipos:

- Difusão apenas
- Advecção-dispersão hidráulica apenas
- Advecção-dispersão hidráulica e elétrica

Cada tipo de simulação deve apontar para uma modelagem correlata. Em geral, não é possível resolver todos os problemas com a mesma equação diferencial.

**R007:** Condições de contorno

Existem três tipos de condições de contorno: (a) Cauchy; (b) Neumann; (c) Robin. As equações a seguir representam essas condições:

$$C_i|_{x=0} = C_a$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial x}|_{x=0} = f(t)$$

$$-D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} - (nk_e + u_i)C_i|_{x=0} = C_a$$

**R008:** Classe Modelagem

Esta classe será construída sobre uma biblioteca para a solução de problemas de fluidodinâmica computacional e servirá para resolver a equação diferencial, conforme as condições de teste dadas na simulação e as condições de contorno do problema.

**R009:** O sistema deve permitir a geração de vários tipos de relatórios.

Alguns relatórios úteis:

- Solos mais utilizados

- Células experimentais mais utilizadas
- Duração dos experimentos
- Principais espécies químicas
- Combinações dos anteriores
- Ranking dos experimentos por duração