



TESE DE DOUTORADO

**Comportamento não-linear de Suspensões Elásticas
Sujeitas a Diferentes Campos de Escoamento:
Modelagem Matemática e Simulação**

Álvaro Moreira Neto

Brasília, Julho de 2018

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

Faculdade de Tecnologia

TESE DE DOUTORADO

**Comportamento não-linear de Suspensões Elásticas
Sujeitas a Diferentes Campos de Escoamento:
Modelagem Matemática e Simulação**

Álvaro Moreira Neto

*TESE SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
MECÂNICA COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENÇÃO
DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS MECÂNICAS.*

Banca Examinadora

Prof. Dr. Francisco Ricardo da Cunha

Presidente, ENM/UnB

Prof. Dr. Rafael Gabler Gontijo

Examinador Interno, UnB/Unicamp.

Prof. Dr. Cezar Otaviano Ribeiro Negrão

Examinador Externo, UTFPR.

Prof. Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira

Examinador Externo, IF/UnB.

Prof. Dr. Carlos Henrique Ribeiro Lima

Suplente, ENC/UnB.

FICHA CATALOGRÁFICA

NETO, ÁLVARO MOREIRA

Comportamento não-linear de Suspensões Elásticas Sujeitas a Diferentes Campos de Escoamento: Modelagem Matemática e Simulação.

[Distrito Federal] 2018.

312p., 210 mm x 297 mm (ENM/FT/UnB, Doutor, Ciências Mecânicas, 2018).

Tese de Doutorado - Universidade de Brasília.

Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Mecânica.

1. Líquido Elástico

2. Dumbbell-Fene

3. Número de Deborah

4. Viscoelasticidade

I. ENM/FT/UnB

II. ENM-DT 52/2018

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

NETO, A. M. (2018). Comportamento não-linear de Suspensões Elásticas Sujeitas a Diferentes Campos de Escoamento: Modelagem Matemática e Simulação. Tese de Doutorado em Ciências Mecânicas, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 312p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Álvaro Moreira Neto.

TÍTULO DA TESE DE DOUTORADO: Comportamento não-linear de Suspensões Elásticas Sujeitas a Diferentes Campos de Escoamento: Modelagem Matemática e Simulação.

GRAU / ANO: Doutor / 2018

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

Álvaro Moreira Neto

Av. Daniel Rodrigues Veodato 105, Ed. Florata, Apto 401.

78735133 – Rondonópolis – MT – Brasil.

AGRADECIMENTOS

A Deus, pelo dom da vida e oportunidade concedida de estudar. Agradeço a meu orientador, professor Franciso Ricardo da Cunha, pela escolha do tema e pela paciência e sabedoria nos momentos de discussões. Ao meu coorientador, professor Yuri Dumaresq Sobral, pela preciosa ajuda nos cálculos numéricos e dicas nas programações. Sem dúvida o fruto desta tese é também grande mérito destes dois professores!

Agradeço a FAPEMAT-MT pelo apoio financeiro, que sem o qual não seria possível realizar este trabalho.

Ao meu primo, Álvaro da Silva Pereira, sua esposa Cynthia e família, em especial Dona Carmém e seu Júlio. Agradeço imensamente a ajuda de meu primo quando na ocasião de minha mudança de Mato Grosso-MT para Brasília-DF em julho de 2014, bem como dos breves momentos que passamos juntos. Não esquecerei dos deliciosos churrascos que compartilhamos!

Aos colegas do doutorado, em especial aos amigos: Nuno Dias, pela acolhida inicial em julho de 2014 e pelas suas primeiras dicas em programação em FORTRAN. Ao amigo Bráulio Pimenta, por suas longas conversas e sua ajuda também em programação. A amiga Camila agradeço a companhia nos estudos de disciplinas que fizemos juntos. Ao amigo Igor Pereira agradeço a oportunidade de me mostrar e ensinar (um pouco) o funcionamento do Reômetro e de gentilmente ceder os dados experimentais que foram utilizados neste trabalho. Ao bom humor, companhia e momentos de distração que passamos juntos no Vortex-UnB, agradeço aos amigos: Igor Pereira, Gesse Roure, Filipe Evangelista e Yuri Sinzato. E é claro ao homem que conhece o caminho das pizzas de Brasília, Gesse Roure, meu muito obrigado!

Por todo apoio logístico gentilmente cedido pelos amigos Adriano Possebon e Lorena Aires eu serei eternamente grato e é claro pela amizade construída nesse período! Sem a ajuda de vocês seria muito difícil concluir o doutorado. Ao amigo de Sobradinho-DF, Rodrigo Oliveira e sua bela família, agradeço ao breve (e não menos importante) apoio logístico também concedido e é claro aos inesquecíveis churrascos!

Finalmente agradeço minha família, minha esposa Livia e minhas filhas Sofia e Alice, pelo carinho, amor e compreensão que tiveram devido aos longos períodos de minha ausên-

cia. Sem o amor de vocês a vida faz menos sentido. A minha mãe agradeço por todo apoio que sempre me deu. A meu pai, por seu olhar de serenidade, mesmo sem a lucidez. Aos meus irmãos, Fernando e Rodrigo Mendes, pela amizade e companhia. Agradeço minha querida avó, Dolores, que sempre foi minha referência de humildade e ser humano, que Deus lhe conceda a felicidade eterna. A todos vocês dedico este trabalho! A todos vocês, de minha família, meu eterno amor!

In memoriam de Fábio Mendes Moreira, meu querido irmão
mais velho.

In memoriam de Dolores Albina Pereira, minha querida avó
que nos deixou em novembro de 2015.

“Os ideais que iluminaram o meu caminho são a bondade, a beleza e a verdade.”

Albert Einstein

“A experiência mais bonita que podemos ter é o mistério. É a emoção fundamental que está no berço da verdadeira arte e da verdadeira ciência. Quem não sabe disso e não consegue mais se maravilhar poderia tão bem estar morto”.

Albert Einstein em “O mundo como eu vejo”, de 1930.

“Uma coisa que aprendi ao longo de minha vida: a nossa ciência, comparada à realidade, é primitiva e infantil – e, mesmo assim, é a coisa mais preciosa que temos”.

(Do livro: Albert Einstein: criador e rebelde, de 1972).

“Toda a educação, no momento, não parece motivo de alegria, mas de tristeza. Depois, no entanto, produz naqueles que assim foram exercitados um fruto de paz e de justiça.”

Hebreus 12,11.

“Pois que aproveita ao homem ganhar o mundo inteiro, se perder a sua alma? Ou que dará o homem em recompensa da sua alma?”

Mateus 16, 26.

Na presente tese realiza-se um estudo teórico de formulação matemática, modelagem, soluções assintóticas e numéricas, visando a caracterização reológica de líquidos elásticos ou suspensões poliméricas diluídas em escoamentos permanentes e transientes. A descrição constitutiva do fluido tem como base um modelo microhidrodinâmico Dumbbell-FENE de duas equações acopladas que descrevem a evolução da deformação no tempo da macromolécula (tensor conformação) e o tensor de tensões. Uma das contribuições relevantes do presente trabalho é possibilitar uma avaliação do comportamento não linear de um fluido elástico não-Newtoniano sujeito a diferentes regimes de escoamentos. A saber: cisalhamento simples, cisalhamento oscilatório, escoamento extensional permanente e transiente, impulso de deformação e escoamento unidirecional em tubo capilar na presença de um gradiente de pressão, no qual o cisalhamento aplicado é não-linear. Com a finalidade de se identificar os parâmetros físicos adimensionais do presente estudo, o par de equações governantes é adimensionalizado segundo uma nova proposta referente à investigações prévias. O tempo de relaxação principal da suspensão polimérica é usado como escala característica de tempo para definição do número de Deborah. Sendo este o parâmetro físico adimensional mais relevante para análise dos escoamentos examinados, já que o mesmo mede a importância relativa entre o tempo de relaxação elástica do fluido e uma escala característica de tempo do escoamento imposto.

Soluções assintóticas para os diferentes escoamentos examinados no limite de pequenos valores do número de Deborah, correspondendo a condição nas vizinhanças do equilíbrio das macromoléculas, são desenvolvidas para validação (“*benchmarks*”) das simulações numéricas realizadas em números de Deborah arbitrários. Por meio da comparação das soluções assintóticas com os resultados numéricos das simulações é possível verificar uma excelente concordância entre os resultados teóricos e numéricos no limite assintótico considerado. Uma nova abordagem é apresentada no que se diz respeito à forma de obtenção da equação de evolução temporal do tensor conformação em que utiliza-se o processo de transformação modal para desacoplar o sistema de equações diferenciais não-lineares resultante ao se analisar o comportamento reológico do fluido sujeito ao cisalhamento simples oscilatório.

Regimes elásticos não lineares envolvendo maiores números de Deborah são examinados

apenas por simulação numérica. Os resultados teóricos do modelo são também comparados com medidas experimentais referentes a quantidades reológicas em regimes de baixos número de Deborah. Uma boa concordância quantitativa pode ser observada, usando-se apenas uma constante de calibração no termo elástico do modelo físico. Mesmo que a suspensão polimérica seja diluída, investigar regimes não-lineares para diferentes configurações de escoamentos reológicos em altos números de Deborah é uma tarefa experimental complexa. A presente proposta contribui também de forma inovadora no sentido de superar em parte essa dificuldade, fornecendo informações relevantes de quantidades reológicas que caracterizam o comportamento de fluidos viscoelásticos em regime não-lineares. Em adição, apresenta-se resultados de estudos da função relaxação de tensões, espectro de tempo de relaxação e análise de Fourier da resposta reológica do fluido em regimes viscoelásticos não-lineares.

Os sistemas de equações diferenciais acopladas não-lineares são integradas numericamente usando o código numérico desenvolvido em Fortran com base no algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem adaptado para a solução do problema de valor inicial dos escoamentos explorados. O passo de tempo numérico é considerado de forma compatível com os parâmetros físicos envolvidos nos escoamentos, como o número de Deborah e a frequência de excitação, no caso de escoamentos transientes ou gerados por impulso de deformação. Uma proposta de um algoritmo baseado em frações continuadas é também desenvolvido para ajustar tanto dados experimentais como também dados de simulações numéricas dos módulos viscoelásticos. Resultados mostrando a eficiência dessa proposta são apresentados com base em medidas experimentais.

Na parte final da tese apresenta-se um estudo teórico-numérico do escoamento da suspensão polimérica em escoamentos na presença de um gradiente de pressão. Investiga-se o desvio do perfil parabólico padrão de escoamentos unidirecionais em tubos como consequência dos efeitos elásticos em diferentes números de Deborah. Como quantidades reológicas, determina-se a viscosidade de parede adimensional em função do número de Deborah baseado na taxa de cisalhamento na parede como também a viscosidade intrínseca relativa calculada em termos da lei de Poiseuille. Um comportamento pseudoplástico com os dois regimes de viscosidade em baixos e altos números de Deborah é também capturado das simulações numéricas.

In the present thesis a theoretical study of mathematical formulation, modeling, asymptotic and numerical solutions, aiming the rheological characterization of elastic liquids or dilute polymeric suspensions in permanent and transient flows. The constitutive description of the fluid is based on a Dumbbell-FENE microhydrodynamic model of two coupled equations describing the time evolution of deformation of the macromolecule (i.e. conformation tensor) and stress tensors. One of the relevant contributions of the present work is to enable an evaluation of the non-linear behavior of a non-Newtonian elastic fluid subjected to different flow regimes. These are: simple shear, oscillatory shear, permanent and transient extensional flow, step-strain and unidirectional flow in capillary tube in the presence of a pressure gradient, in which the applied shear is non-linear. In order to identify the non-dimensional physical parameters of the present study, the pair of governing equations is made non-dimensional according to a new proposal referring to previous investigations. The main relaxation time of the polymer suspension is used as the characteristic time scale for defining the Deborah number. This being the most relevant non-dimensional physical parameter of the examined flows, since it measures the relative importance between the elastic relaxation time of the fluid and a characteristic time scale of the imposed flow.

Asymptotic solutions for the different examined flows at the limit of small values limit of Deborah numbers, which corresponds to the condition of equilibrium in the vicinity of the macromolecules, are developed for validation (“*benchmarks*”) of the numerical simulations performed in arbitrary Deborah numbers. By comparing the asymptotic solutions with the numerical results of the simulations, it is possible to verify an excellent agreement between the theoretical and numerical results in the assumed asymptotic limit. A new approach is presented regarding the way of obtaining the time evolution equation of the conformation tensor in which the modal transformation process is used to uncouple the system from nonlinear differential equations resulting from the analysis of the rheological behavior of the fluid subjected to oscillatory simple shear.

Nonlinear elastic schemes involving larger Deborah numbers are examined only by numerical simulation. The theoretical results of the model are also compared with experimental data concerning rheological quantities in low Deborah number. A good quantitative agree-

ment can be observed, using only a calibration constant in the elastic term of the physical model. Although the polymer suspension is dilute, to investigate nonlinear regimes for different configurations of rheological flows in high Deborah numbers is a complex experimental task. The present proposal also contributes in an innovative way to partially overcome this difficulty by providing relevant information on rheological quantities that characterize the behavior of viscoelastic fluids in nonlinear regime. In addition, we present results from stress relaxation function, time relaxation spectrum and Fourier analysis of the fluid response in nonlinear regimes.

The systems of nonlinear coupled differential equations are numerically integrated by using a numerical code developed in Fortran based on the fourth-order Runge-Kutta algorithm adapted for the solution of the initial value problem of the explored flows. The numerical time step is considered in a way compatible with the physical parameters involved in the flows, such as the Deborah number and the excitation frequency, in the case of transient flows and the flow generated by a step strain. A proposal of an algorithm based on continued fractions is also developed in order to fit both experimental data and numerical simulations data of the viscoelastic modules. The results showing the efficiency and accuracy of this proposal are demonstrated with experimental data.

In the final part of the thesis is presented a theoretical-numerical study of the polymer suspension flow in the presence of a pressure gradient driving flow. We investigate the deviation of the standard parabolic profile of unidirectional flows in tubes as a consequence of the elastic effects in different Deborah numbers. In terms of rheological quantities, the non-dimensional wall viscosity is determined as a function of the Deborah number based on the shear rate on the wall as well as the relative intrinsic viscosity calculated in terms of Poiseuille's law. A shear-thinning behavior for the for the both viscosities at low and high Deborah numbers is also captured by the numerical simulations.

LISTA DE FIGURAS

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Escoamento em cisalhamento simples representado pela adição dos efeitos de deformação e de rotação. Fonte: [23]. | 13 |
| 2.2 | Representação do efeito de inchamento do extrudado (<i>die swell</i>) para um fluido newtoniano (N) e um fluido polimérico (P). Fonte: [8]. | 16 |
| 2.3 | Experimento “ <i>rod climbing</i> ”. Na figura (b) tem-se o comportamento de um fluido polimérico sendo “puxado” para cima. Em (a) tem-se a representação das forças que agem no movimento. Fonte: [33],[54]. | 17 |
| 2.4 | Solução com diferentes frações volumétricas. | 21 |
| 2.5 | Distribuição do valor de a em relação ao valor de $\sqrt{N}\delta$, a medida que N aumenta no conjunto A . Foi usado $\delta = 1\mu m$ fixo. A linha pontilhada representa a função identidade. | 23 |
| 2.6 | Média e variância dos N números aleatórios gerados randomicamente no intervalo $[-1, 1]$. Acima tem-se a variância convergindo para um e abaixo tem-se a média convergindo para zero. | 24 |
| 2.7 | Representação de duas macromoléculas em seu estado de equilíbrio randômico. Em (a) temos 100 esferas e em (b) 300. | 25 |
| 2.8 | Representação esquemática da taxa de deformação e taxa de cisalhamento do escoamento por taxa de deformação aplicada. | 47 |
| 2.9 | Modelo ilustrativo de um elemento de Maxwell. Em η tem-se representado o elemento viscoso e em α tem-se o elemento elástico. | 49 |

| | | |
|------|---|----|
| 2.10 | Modelo esquemático de um fluido complexo formado por N elementos de Maxwell. | 56 |
| 3.1 | Reômetro Anton Paar-Modelo Physica MCR 301. | 62 |
| 3.2 | Esquema de funcionamento do reômetro de placas paralelas. O disco de raio R gira sobre a placa. O fluido reside no espaçamento (“gap”) de comprimento δ entre o disco e a placa. A direção θ é perpendicular ao plano da página. Fonte: [53]. | 63 |
| 3.3 | Sistemas de filtros de óleo (os dois filtros da esquerda), desumidificador (braço branco horizontal central) e filtro de partículas (filtro mais a direita). | 64 |
| 3.4 | Banho térmico Lauda com controle digital de temperatura. | 65 |
| 3.5 | Representação esquemática de macromoléculas lineares e ramificadas. Fonte: Bird et al, 1987 [8]. | 69 |
| 3.6 | Monômero e unidade estrutural da PAMA. Fonte: [8]. | 70 |
| 3.7 | Aspectos macroscópicos de duas suspensões de poliacrilamida aniônica a fração volumétrica de: (a) $\phi = 400 \text{ ppm}$ e (b) $\phi = 5000 \text{ ppm}$ | 72 |
| 3.8 | Variação da viscosidade adimensional $\mu_s(\phi)/\mu_w$ em função da fração volumétrica ϕ da PAMA a 20°C . O ajuste linear (linha pontilhada) é o proposto pela teoria de Einstein e é dado por: $\mu_s(\phi) = \mu_w(1 + c\phi)$, com $c = c_1 = 1.53 \times 10^5$. E a curva parabólica (linha contínua), trata do ajuste feito através do modelo de Batchelor-Green [7]: $\mu_s(\phi) = \mu_w(1 + c_1\phi + c_2\phi^2)$, com $c_2 = 1.63 \times 10^8$. No encarte temos em detalhe o ajuste linear para ϕ até 300 ppm . Fonte: [51]. | 75 |
| 3.9 | Quadrados abertos denotam a viscosidade adimensional μ_s/μ_w de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica $\phi = 400 \text{ ppm}$ em função da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$. A linha pontilhada representa o ajuste feito através do modelo de Cross (seção (2.5)) adimensional dada por $\frac{\mu_s(\dot{\gamma})}{\mu_w} = \frac{1}{\mu_w} \left(\frac{\mu_0 + \mu_\infty(k\dot{\gamma})^m}{1 + (k\dot{\gamma})^m} \right)$, com $\mu_0 = 315.1 \text{ cP}$, $\mu_\infty = 1.073 \text{ cP}$, $k = 0.735114$ e $m = 0.604323$. Na verdade para $\dot{\gamma} = 0.04 \text{ s}^{-1}$ obteve $\mu_s/\mu_w = 307.26$, sendo assim extrapolou-se o valor de μ_0 para $\mu_0 = 315.1 \text{ cP}$ afim de se obter um melhor ajuste pelo modelo de Cross. | 77 |

| | | |
|------|---|-----|
| 3.10 | Módulos viscoelásticos η' e η'' obtidos experimentalmente. Os quadrados abertos em (a) denotam o módulo viscoso η' . Os quadrados abertos em (b) denotam o módulo elástico η'' . Ambos os resultados foram obtidos de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 ppm$ a $20^\circ C$. As linhas pontilhadas em (a) e (b) representam os respectivos ajustes feito pelo modelo de Maxwell dado pelas equações (3.19) e (3.20), respectivamente. | 82 |
| 3.11 | Módulos viscoelásticos G' e G'' obtidos experimentalmente. Os quadrados abertos em (a) denotam o módulo elástico G' . Os quadrados abertos em (b) denotam o módulo viscoso G'' . Ambos os resultados foram obtidos de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 ppm$ a $20^\circ C$. As linhas pontilhadas em (a) e (b) representam o ajuste feito pelo modelo de Maxwell dado pelas equações (3.21) e (3.22), respectivamente. | 84 |
| 3.12 | Quadrados abertos denotam os dados experimentais da função relaxação de tensão $\Phi(s)$ para uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 ppm$. A linha pontilhada trata do ajuste feito pela equação (3.24) no qual obteve-se: $\eta_1 = 0.4654 Pa s$ e $\alpha_1 = 0.01204 s$. Parâmetros: $\gamma_0 = 0.1$ e $dt = 8 \times 10^{-3} s$. Fonte: [51]. | 86 |
| 4.1 | Representação esquemática de uma macromolécula no modelo “ <i>dumbbell</i> ”. O vetor \mathbf{r} liga as extremidades da macromolécula de ponta-a-ponta e δ é o comprimento de um monômero individual, como visto na seção (2.2). | 91 |
| 5.1 | Evolução temporal somente da contribuição da conformação das macromoléculas da função $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ para quatro valores do parâmetro De para o escoamento por cisalhamento simples. Em: (a) $De = 0.10$, (b) $De = 1.0$, (c) $De = 10.0$ e (d) $De = 50.0$. Note que os casos (c) e (d) apresentam resultados semelhantes, pois a macromolécula já atingiu seu estiramento máximo para altos números de Deborah. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 ppm$ | 104 |

- 5.2 Primeira diferença de tensões normais adimensional \tilde{N}_1/ϕ em função de De . Pontos denotados por quadrados abertos representam a solução por integração numérica das equações (4.34) e (4.35) e a linha pontilhada representa a solução analítica dada pela equação (5.9). O encarte mostra a dependência quadrática de \tilde{N}_1/ϕ para $De \rightarrow 0$, i.e., no regime de pequenas deformações. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$ 108
- 5.3 Comparação das propriedades viscosas $\eta'(\dot{\gamma})$ e $\eta'(\omega)$ e elásticas $N_1(\dot{\gamma})/2$ e $G'(\omega)$ para diferentes suspensões de poliestireno em 1-cloronaftaleno. Também é mostrada a magnitude da viscosidade complexa η^* , que deve ser igual a η de acordo com o critério de equivalência de Cox-Merz. (a) Poliestireno linear 0.15 g/ml , (b) Poliestireno ramificado 0.45 g/ml e (c) Poliestireno Styron 0.42 g/ml . Fonte: Yasuda et al., 1981 [65]. 110
- 5.4 Solução numérica, analítica e medidas experimentais adimensionais da primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 , para uma suspensão de PAMA a concentração de $\phi = 400 \text{ ppm}$. Parâmetro: $L = 60$ 113
- 5.5 Comparação entre os resultados numéricos e medidas experimentais da medição da viscosidade de uma suspensão de PAMA a $\phi = 400 \text{ ppm}$, em função de De . Os dados das simulações numéricas estão representados nos círculos cheios. As medidas experimentais estão representadas nos quadrados abertos. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ 116
- 5.6 Função relaxação de tensão adimensional $\tilde{\Phi}/\phi$ para o escoamento por impulso de deformação. Os quadrados abertos denotam a solução numérica da função $\tilde{\Phi}(\tilde{s})$. Na linha pontilhada tem-se o ajuste feito pelo modelo de viscoelasticidade linear de Maxwell dado por $\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \frac{\tilde{\eta}_1}{\tilde{\alpha}_1} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_1)$, em que: $\tilde{\eta}_1 = 0.0804$ e $\tilde{\alpha}_1 = 0.4998$. Parâmetros: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ 119
- 5.7 Viscosidade extensional adimensional relativa, $\tilde{\mu}_e - \hat{\mu}$, em função do tempo adimensional \tilde{t} . No gráfico tem-se, de baixo para cima, em ordem crescente, os seguintes valores para o número de Deborah: $De = 0.35; 0.45; 0.50; 0.55; 0.60; 0.65$. No encarte a viscosidade extensional adimensional relativa foi multiplicada por um fator de 10^5 , para uma melhor interpretação do resultado quando \tilde{t} varia no intervalo $[10^{-2}, 4]$. Ainda no encarte tem-se, de baixo para cima, os valores de $De = 0.35; 0.45; 0.50; 0.55$. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ 127

| | | |
|------|---|-----|
| 5.8 | Viscosidade extensional relativa $\tilde{\mu}_e - \hat{\mu}$ em função do número de Deborah para diferentes valores do parâmetro L . Na figura, debaixo para cima, tem-se: $L = 4, 10, 15, 25, 35$. No encarte tem-se a solução analítica (linha contínua) dada pela equação (5.46) e a solução numérica nos quadrados abertos para $L = 35$. Parâmetro: $\phi = 400 \text{ ppm}$ | 129 |
| 5.9 | Valor do comprimento de $R^2 = \text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})$ em função do tempo adimensional \tilde{t} . Aqui, debaixo para cima, os gráficos são referentes aos seguintes valores de Deborah: $De = 0.45; 0.55; 0.65; 0.75; 0.85; 1.00$. Os patamares alcançados nesta figura indicam que a macromolécula degradou, a partir dos respectivos \tilde{t} . No encarte desta figura tem-se em detalhe a pouca variação de $R \approx 1$ para $0.1 \leq \tilde{t} \leq 1$. Ainda no encarte, tem-se debaixo para cima, os seguintes valores de $De = 0.45; 0.55; 0.65; 0.75$. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ | 130 |
| 5.10 | Na linha contínua tem-se a variação do comprimento de $R = \sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}$ em função do número de Deborah. Apresenta-se também o valor constante $R = 3.5$, na linha pontilhada. Parâmetros: $L = 3.5$ e $\phi = 200 \text{ ppm}$ | 131 |
| 6.1 | Solução assintótica do coeficiente viscoso relativo, $\tilde{\eta}'_r/\phi$, em função da frequência adimensional $\tilde{\omega}$. Na linha pontilhada tem-se o valor constante $\tilde{\eta}'_r = 0.75$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$ | 136 |
| 6.2 | Solução assintótica do coeficiente elástico em função da frequência adimensional. Na linha pontilhada tem-se o valor constante $\tilde{\eta}''/\phi = 0.375$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$ | 137 |
| 6.3 | Comportamento da componente $\tilde{\sigma}_{12}$ em função do tempo adimensional. Os quadrados abertos denotam a solução numérica. A linha pontilhada que segue os quadrados abertos representam a solução assintótica dada pela equação (6.10). A solução constante, $\tilde{\sigma}_{12} \approx 10.2$, para o regime permanente $\tilde{\omega} = 0$ é apresentada na linha tracejada. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $De = 0.1$, $L = 60$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\tilde{\mu}(De) = 102.07$ dado pelo modelo de Cross. | 139 |

- 6.4 Comportamento da função $\tilde{\sigma}_{12}$ em função do tempo adimensional \tilde{t} para vários valores do número de Deborah. Em (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 0.1; 1; 5; 10$. Apresenta-se também a solução constante no regime permanente onde $\tilde{\omega} = 0$ para cada caso (a), (b) e (c). Em (d) tem-se em ordem crescente de amplitude os casos $De = 0.1; 1; 5$ e 10 , respectivamente. Foi utilizado ainda $\tilde{\mu}_s(De)$ de acordo com o modelo de Cross. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$ 141
- 6.5 Diagramas de fase de $\tilde{\sigma}_{12}$ para vários valores do parâmetro De . Os diâmetros dos círculos aqui representados são numericamente iguais às amplitudes de oscilação da função $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ da figura (6.4). Aqui foi utilizado $\tilde{\mu}_s(De)$ de acordo com o modelo de Cross. Nos círculos concêntricos tem-se, do menor para o maior, os casos: $De = 0.1; 1; 5$ e 10 . Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$ 142
- 6.6 Contribuição dos efeitos da conformação das macromoléculas na função $\tilde{\sigma}_{12}$. Os quadrados abertos denotam a solução numérica da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ (eq.(6.23)) e na linha contínua tem-se a solução da função \tilde{f}_{12}/ϕ (eq.(6.24)). No encarte vê-se em detalhes a comparação destas equações para $0 \leq De \leq 0.1$. Parâmetros: $L = 60$, $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\mu}_s(\phi) = 17$ e $\tilde{\omega} = 1$ 145
- 6.7 Contribuição viscosa da conformação das macromoléculas em função do tempo \tilde{t} . Em (a) $De = 0.1$, nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica da equação (6.22) e na linha contínua tem-se a função \tilde{f}_{12}/ϕ dada pela equação (6.21). Em (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$ tem-se também a variação temporal da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ (eq.(6.22)). Parâmetros utilizados: $L = 60$, $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\tilde{\mu}(\phi) = 17$ 146
- 6.8 Diagramas de fase da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ para vários valores do parâmetro De . Em: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros: $L = 60$, $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\tilde{\mu}(\phi) = 17$ 147
- 6.9 Comparação assintótico-numérico dos módulos viscoelásticos da tensão de cisalhamento $\tilde{\sigma}_{12}$. Em (a) tem-se o módulo relativo viscoso adimensional $\tilde{\eta}'_r/\phi$ assintótico (linha pontilhada) e numérico (quadrados abertos). Em (b) tem-se o módulo elástico adimensional $\tilde{\eta}''/\phi$ assintótico (linha pontilhada) e numérico (quadrados abertos). Parâmetros utilizados: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ 149

| | | |
|------|---|-----|
| 6.10 | Resultados numéricos dos módulos viscoelásticos $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e $\tilde{\eta}''/\phi$ para vários valores do parâmetro De . Em (a) tem-se o módulo viscoso relativo $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e em (b) tem-se o módulo elástico $\tilde{\eta}''/\phi$. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$ e $L = 60$ | 152 |
| 6.11 | Valores dos módulos viscoelásticos em função de De avaliados para a frequência $\tilde{\omega} = 0.1$ fixa. Os quadrados cheios em (a) e (b) denotam as soluções numéricas e as linhas pontilhadas representam os ajustes polinomiais $f(De)$ e $g(De)$. Em (a) tem-se a função f dada por $f(De) = 0.7462 + aDe^2 + bDe^4$ com $a = 0.0315$ e $b = 0.0129$. Em (b) a função g é dada por $g(De) = 0.0373 + cDe^2 + dDe^4$ com $c = -0.00387$ e $d = 0.005459$ | 154 |
| 6.12 | Espectros de potência para os coeficientes de Fourier ou módulos viscoelásticos em fase e fora de fase, da tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}$, para diferentes valores de De . Parâmetros: $\phi = 400 ppm$ e $L = 60$. Aqui foi utilizado $\tilde{\mu}_s(De)$ de acordo com a equação (5.14). | 156 |
| 6.13 | Espectros de potência em fase e fora de fase da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ para vários valores de De . Em: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros utilizados: $\tilde{\omega} = 1$, $L = 60$, $\tilde{\mu}_s = 17$ e $\phi = 400 ppm$ | 158 |
| 6.14 | Primeira diferença de tensões normais adimensional $\tilde{N}_1/(\phi De^2)$ em função do tempo adimensional \tilde{t} . Os quadrados abertos denotam a solução numérica e a linha contínua representa a solução assintótica dada pela equação (6.28). Parâmetros: $\phi = 400 ppm$, $L = 60$, $De = 0.1$ e $\tilde{\omega} = 1$ | 160 |
| 6.15 | Primeira diferença de tensões normais adimensional $\tilde{N}_1/(\phi De^2)$ em função do tempo adimensional \tilde{t} para vários valores do parâmetro De . Em (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Nos encartes vemos a variação temporal das tensões normais $\tilde{\sigma}_{11}/\phi$ e $\tilde{\sigma}_{22}/\phi$ para cada De simulado. Parâmetros: $\tilde{\omega} = 1$, $\phi = 400 ppm$ e $L = 60$ | 161 |
| 6.16 | Diagramas de fase da função $\tilde{N}_1^* = \tilde{N}_1(\tilde{t})/(\phi De^2)$ para vários valores do número de Deborah. Em: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$ | 163 |

- 6.17 Média da primeira diferença de tensões normais adimensional, $\langle \tilde{N}_1 \rangle$, em função do número de De , para o cisalhamento simples oscilatório. Para cada De foi obtida a média temporal da função \tilde{N}_1 para a frequência $\tilde{\omega} = 1$ fixa. A linha pontilhada trata do ajuste dado pela função: $f(De) = aDe^2 + bDe^4$, com $a = 0.0097$ e $b = 0.004$. Parâmetros $\phi = 400 \text{ ppm}$, $L = 60$ e $\tilde{\omega} = 1$ 164
- 6.18 Módulos viscoelásticos β' e β'' da função \tilde{N}_1^* . Em (a), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica do coeficiente viscoelástico em fase com a excitação, $\tilde{\beta}'$, na linha pontilhada tem-se a solução assintótica dada pela equação (6.31). Em (b), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica do coeficiente viscoelástico fora de fase com a excitação, $\tilde{\beta}''$, e na linha pontilhada tem-se a solução assintótica dada pela equação (6.32). Parâmetros: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ 166
- 6.19 Módulo dos espectros de potência em fase e fora de fase da primeira diferença de tensões normais adimensional, $E_{\tilde{N}_1^*(\tilde{\omega})}$. Aqui $\tilde{N}_1^* = \tilde{N}_1(\tilde{t})/(\phi De^2)$ para: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros: $\tilde{\omega} = 1$, $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$ 168
- 6.20 Módulo viscoelástico em fase $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ da primeira diferença de tensões normais em função do parâmetro De^2 . Os quadrados abertos representam os valores numéricos para vários De^2 , a linha pontilhada denota o ajuste polinomial dado por: $f(De) = 0.373 + aDe^2 + bDe^4 + cDe^6 + dDe^8 + eDe^{10}$, em que $a = 0.165426$, $b = -0.193736$, $c = 0.121118$, $d = -0.0262297$ e $e = 0.00190248$. No encarte, pode-se ver, em detalhes, o comportamento de $\tilde{\beta}'$ para $De \ll 1$. O módulo em fase $\tilde{\beta}'$ é praticamente constante para $De \ll 1$ e aproximadamente igual a 0.373. 170
- 6.21 Resultados numéricos da Função relaxação de tensão $\tilde{\Phi}(\tilde{s})$ obtida pelas transformadas de Fourier seno (*) e cosseno (\square). Na linha pontilhada temos o ajuste feito com um elemento de Maxwell, dado pela equação (6.36), e obteve-se: $\tilde{\eta}_1 = 0.7398$; $\tilde{\alpha}_1 = 0.4923$. Parâmetros utilizados: $De = 0.1$, $L = 60$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ 172

- 6.22 Função relaxação de tensão Φ no regime não linear. Em (a), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica de $\tilde{\Phi}$ para $De = 2$ e na linha pontilhada tem-se o ajuste com dois elementos de Maxwell, i.e., $\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \frac{\tilde{\eta}_1}{\tilde{\alpha}_1} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_1) + \frac{\tilde{\eta}_2}{\tilde{\alpha}_2} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_2)$, em que $\tilde{\eta}_1 = 4.11012$; $\tilde{\alpha}_1 = 1.68783$; $\tilde{\eta}_2 = 6.6435$; $\tilde{\alpha}_2 = 0.4905$. Em (b), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica de $\tilde{\Phi}$ para $De = 3$ e na linha pontilhada tem-se o ajuste com três elementos de Maxwell, i.e., $\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \frac{\tilde{\eta}_1}{\tilde{\alpha}_1} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_1) + \frac{\tilde{\eta}_2}{\tilde{\alpha}_2} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_2) + \frac{\tilde{\eta}_3}{\tilde{\alpha}_3} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_3)$, com $\tilde{\eta}_1 = 6.663$; $\tilde{\alpha}_1 = 0.508$; $\tilde{\eta}_2 = 11.948$; $\tilde{\alpha}_2 = 2.712$; $\tilde{\eta}_3 = 60.602$; $\tilde{\alpha}_3 = 31.995$ 174
- 6.23 Utilização das relações de Kramers-Kronik (K-K) para obtenção dos módulos viscoelásticos η' e η'' em regime de viscoelasticidade linear. Em (a), na linha pontilhada, é dada a solução numérica de $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e nos quadrados abertos tem-se o mesmo módulo obtido pela segunda equação de (6.38). Em (b), na linha pontilhada, é dada a solução numérica de $\tilde{\eta}''/\phi$ e nos quadrados abertos tem-se o mesmo módulo obtido pela primeira equação de (6.38). Parâmetros: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 ppm$ 176
- 6.24 Ajuste por frações continuadas dos módulos viscoelásticos η' e η'' . Em (a), na linha pontilhada, tem-se o ajuste dos dados experimentais (quadrados abertos) do módulo viscoso η' . Em (b), na linha pontilhada, tem-se o ajuste dos dados experimentais (quadrados abertos) do módulo elástico η'' . Dados experimentais obtidos de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica $\phi = 10000 ppm$ a $20^\circ C$ 180
- 6.25 Soluções no limite assintótico (linha contínua) e numérica (quadrados abertos) das funções: Em (a) $\tilde{\sigma}_{11}$, (b) $\tilde{\sigma}_{22}$ e (c)=(d) $\tilde{\mu}_e$, do escoamento extensional oscilatório. As soluções assintóticas nas linhas contínuas em (a), (b) e (c) foram obtidas por integração numérica das equações (6.54), (6.55) e (6.57), respectivamente. Os quadrados abertos em (a), (b) e (c) denotam as soluções numéricas da primeira e terceira equação do sistema (6.48) e posterior uso das equações (6.49) e (6.56). Na figura (d) apresenta-se, também, o caso permanente em que $\tilde{\omega} = 0$, para a viscosidade extensional adimensional. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$, $L = 60$, $De = 0.1$ e $\tilde{\omega} = 1$ 185

| | | |
|------|---|-----|
| 6.26 | Variação do comprimento de $R = \sqrt{tr(\tilde{\mathbf{B}})}$ em função do parâmetro De para o escoamento extensional oscilatório. No gráfico (a) tem-se na linha pontilhada o caso constante $R = 3.5$ e no encarte nota-se apenas uma pequena variação de R para $0.1 \leq De \leq 1$. Em (b) tem-se a variação de R para $1 \leq De \leq 5$. Parâmetros: $L = 3.5$, $\phi = 200 ppm$ e $\tilde{\omega} = 1$ | 187 |
| 6.27 | Solução numérica para o cálculo da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$ para quatro valores do parâmetro De . Em (a) $De = 1$, (b) $De = 2.73$, (c) $De = 2.80$ e (d) $De = 2.90$. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$ | 188 |
| 6.28 | Diagramas de fase referente a série temporal da viscosidade extensional adimensional, $\tilde{\mu}_e$, para quatro valores do parâmetro De . Em (a) $De = 1$, (b) $De = 2.73$, (c) $De = 2.80$ e (d) $De = 2.90$. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$ | 190 |
| 6.29 | Primeiros coeficientes em fase e fora de fase com a taxa de estiramento da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$. Em (a) tem-se o coeficiente $\xi_1'(\tilde{\omega})$ em fase com excitação $\tilde{\epsilon} = De \cos(\tilde{\omega}t)$. Em (b) tem-se o coeficiente fora de fase $\xi_1''(\tilde{\omega})$. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$ e $L = 60$ | 192 |
| 6.30 | Módulo dos espectros de potência em fase e fora de fase da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$ para $\tilde{\omega} = 1$ fixo e diferentes valores do número de Deborah De . Em (a) $De = 1$, (b) $De = 2.73$, (c) $De = 2.80$ e (d) $De = 2.90$. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$ e $L = 60$ | 194 |
| 6.31 | Conformação das macromoléculas para um escoamento oscilatório simples de pura rotação. Quadrados abertos representam a solução numérica da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ (eq. (6.78)) e na linha contínua tem-se a solução assintótica nula dada pela equação (6.77), ambas para um mesmo t^* fixo. No encarte tem-se com mais detalhes estas funções para De até 0.35, donde se vê que $\tilde{\sigma}_{12}^M < 1\%$. Parâmetros: $\phi = 400 ppm$, $\tilde{\mu}_s = 17$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$ | 201 |
| 7.1 | Representação esquemática do escoamento num tubo. R_T = raio do tubo (fixo). C = comprimento do tubo (fixo). $u_z(r)$ = perfil de velocidade desenvolvido. | 204 |
| 7.2 | Perfis de velocidade de $u_z(r)$ para quatro valores distintos do gradiente de pressão ao longo do tubo. | 205 |

| | | |
|------|--|-----|
| 7.3 | Perfil de velocidade de um fluido na ausência de macromoléculas. Na linha pontilhada tem-se a solução analítica dada pela equação (7.52). Quadrados abertos denotam a solução numérica da equação (7.51). Parâmetros: $\tilde{G}_p = 8$, $Re = 0$, $L = 60$, $\phi = 0$ e determinou-se que $\mathbb{I}_V = 0.49990$ | 215 |
| 7.4 | Perfil de velocidade \tilde{u} . Na linha contínua tem-se a solução analítica para o caso $\phi = 0$ dada pela equação (7.52) em que $\tilde{G}_p = 8$. Os quadrados abertos representam a solução numérica para $\phi = 400 \text{ ppm}$, $De = 0.01$ e $\tilde{G}_p = 8.08$. Os quadrados fechados representam a solução assintótica dada pela equação (7.43). Foi calculado $\mathbb{I}_V = 0.49984$. Parâmetros: $De = 0.01$, $L = 3.5$, $Re = 0$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ | 217 |
| 7.5 | Variação do gradiente de pressão relativo adimensional ($\tilde{G}_p - 8$) e da velocidade máxima relativa ($2 - \tilde{u}_{max}$), ambos em função do número de Deborah. Nos círculos abertos em (a) tem-se a comparação entre ($\tilde{G}_p - 8$) e De . Em (b), nos círculos abertos, tem-se a comparação entre De e a velocidade máxima relativa dada por ($2 - \tilde{u}_{max}$). Parâmetros: $\phi = 0.01$ e $L = 3.5$ | 219 |
| 7.6 | Perfil de velocidade \tilde{u} para três valores do parâmetro De . Na linha contínua tem-se o caso $De = 0.01$ onde $\tilde{u}_{max} = 1.9975 \approx 2$. Na linha pontilhada do meio tem-se o caso $De = 10$ onde $\tilde{u}_{max} \approx 1.8134$. E na linha pontilhada mais interna tem-se o caso $De = 20$ onde $\tilde{u}_{max} \approx 1.7165$. Parâmetros considerados: $L = 3.5$ e $\phi = 0.01$ | 221 |
| 7.7 | Comportamento pseudoplástico das viscosidades aparente intrínseca e na parede de uma suspensão polimérica. Em (a) tem-se a viscosidade aparente intrínseca, $\tilde{\mu}_s$, em função do número de De . Em (b) tem-se e viscosidade na parede $\tilde{\mu}_p$ em função do número de Deborah de parede, De_p . Parâmetros: $L = 3.5$ e $\phi = 0.01$ | 223 |
| II.1 | Componentes do tensor de tensões σ em coordenadas retangulares. | 250 |
| II.2 | Forças atuando instaneamente sobre um meio contínuo no interior de um pequeno elemento δV na forma de um tetraedo. Fonte: Internet | 252 |

LISTA DE TABELAS

| | | |
|-----|---|-----|
| 1.1 | Modelos de equações constitutivas e suas vantagens. | 9 |
| 3.1 | Valores experimentais da viscosidade adimensional $\mu_s(\phi)/\mu_w$ e seus respectivos valores de fração volumétrica ϕ . Apresentamos também o erro experimental. | 73 |
| 3.2 | Valores das constantes de ajuste η_j e α_j do modelo de Maxwell para a função $\eta'(\omega)$ | 81 |
| 3.3 | Valores das constantes de ajuste η_j e α_j do modelo de Maxwell para a função $\eta''(\omega)$ | 81 |
| 3.4 | Valores das constantes de ajuste η_j e α_j do modelo de Maxwell para a função $G'(\omega)$ | 83 |
| 3.5 | Valores das constantes de ajuste η_j cP e α_j do modelo de Maxwell para a função $G'''(\omega)$ | 83 |
| 5.1 | Valor do tempo adimensional \tilde{t} a partir do qual a contribuição elástica da função $\tilde{\sigma}_{12}$ possui um comportamento constante. | 103 |
| 5.2 | Valores experimentais da primeira diferença de tensão normal adimensional \tilde{N}_1 e respectivos valores de De^2 de uma suspensão diluída de PAMA para $\phi = 400 \text{ ppm}$ | 112 |
| 5.3 | Solução numérica da primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 , solução assintótica $\tilde{N}_1 = 15500De^2$ e o erro relativo entre ambas. | 114 |

| | | |
|------|---|-----|
| 6.1 | Valores das funções $\tilde{\sigma}_{12}^M$, \tilde{f}_{12} e erro relativo entre ambas, para vários valores do parâmetro De | 145 |
| 6.2 | Alguns valores de $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ e os erros relativos associados. | 169 |
| 6.3 | Valor dos módulos viscoelásticos η' e η'' para várias frequências ω de uma suspensão diluída de PAMA com $\phi = 0.01$ obtidos experimentalmente. | 179 |
| 7.1 | Valores numéricos de $(\tilde{G}_p - 8)$ e da velocidade máxima relativa $(2 - \tilde{u}_{max})$ para vários valores de De . Parâmetros: $\phi = 0.01$ e $L = 3.5$ | 220 |
| IV.1 | Tabela de Runge-Kutta ou Butcher | 268 |
| IV.2 | Tabela de Butcher para dois estágios | 268 |
| IV.3 | Tabela de Butcher para $\nu = 2$ estágios. | 270 |
| IV.4 | Metódo de Runge-Clássico..... | 270 |
| IV.5 | Metódo de Nystrom. | 271 |
| IV.6 | Metódo de Runge-Kutta de quatros estágios e quarta ordem. | 271 |

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

| Símbolo | Nome | [Unidade no S.I.] |
|--------------|--|------------------------------------|
| S | Área | $[m^2]$ |
| M | Massa | $[Kg]$ |
| t | Tempo | $[s]$ |
| \hat{t} | Símbolo alternativo para tempo | $[s]$ |
| D | Coefficiente de Difusão Browniano | $[m^2 s^{-1}]$ |
| T | Temperatura | $[K]$ |
| K_B | Constante de Boltzmann | $[JK^{-1} = Kg m^2 s^{-2} K^{-1}]$ |
| Q | Vazão | $[m^3 s^{-1}]$ |
| \mathbf{D} | Tensor taxa de deformação | $[s^{-1}]$ |
| \mathbf{E} | Símbolo alternativo para o tensor taxa de deformação | $[s^{-1}]$ |
| \mathbf{F} | Tensor gradiente de deformação | |
| \mathbf{u} | Vetor Campo de Velocidade | $[m s^{-1}]$ |
| \mathbf{I} | Tensor Identidade | |
| \mathbf{W} | Tensor taxa de rotação | $[s^{-1}]$ |
| G' | Módulo elástico de cisalhamento | $[Pa]$ |
| G'' | Módulo viscoso | $[Pa]$ |
| V | Volume | $[m^3]$ |
| V_p | Volume total de partículas | $[m^3]$ |
| N_1 | Primeira diferença de tensões normais | $[Pa]$ |
| N_2 | Segunda diferença de tensões normais | $[Pa]$ |
| G_p | Gradiente de pressão | $[Pa m^{-1}]$ |
| E | Energia devida ao movimento Browniano | $[J]$ |
| a | Distância de equilíbrio da macromolécula | $[m]$ |

Símbolos Gregos

| | | |
|--------------------|--|---------------------------|
| Δ | Varição entre duas grandezas similares | |
| ρ | Massa específica | $[m^3 kg^{-1}]$ |
| Σ | Tensor de tensões | $[Pa = Kg m^{-1} s^{-2}]$ |
| σ | Símbolo alternativo para o tensor de tensões | $[Pa]$ |
| $\dot{\gamma}$ | Taxa de deformação ou cisalhamento | $[s^{-1}]$ |
| $\dot{\gamma}_p$ | Taxa de cisalhamento na parede | $[s^{-1}]$ |
| τ_p | Tempo de relaxação principal | $[s]$ |
| τ | Tempo de relaxação | $[s]$ |
| ω | Frequência | $[s^{-1}]$ |
| α_1 | Símbolo alternativo para tempo de relaxação | $[s]$ |
| μ_e | Viscosidade Extensional | $[Pa s]$ |
| ω | Frequência | $[s^{-1}]$ |
| Ψ_1 | Primeiro coeficiente de tensões normais | $[Pa s^2]$ |
| Ψ_2 | Segundo coeficiente de tensões normais | $[Pa s^2]$ |
| μ | Viscosidade de um fluido base | $[Pa s]$ |
| η | Símbolo alternativo para Viscosidade | $[Pa s]$ |
| μ_w | Viscosidade da água a $20^\circ C$ | $[Pa s]$ |
| μ_s | Viscosidade da suspensão polimérica | $[Pa s]$ |
| μ_p | Viscosidade na parede do tubo | $[Pa s]$ |
| v | Tempo de retardação | $[s]$ |
| η' | Coeficiente Viscoso | $[Pa s]$ |
| η'' | Coeficiente Elástico | $[Pa s]$ |
| $\dot{\epsilon}$ | Taxa de estiramento | $[s^{-1}]$ |
| \propto | Proporcionalidade | |
| κ | Segundo coeficiente de viscosidade | $[Pa s]$ |
| \mathcal{T} | Torque | $[Nm]$ |
| ϖ | Frequência no espaço da DFT | |
| $\vartheta(\cdot)$ | Função impulso | |

Operadores

| | |
|------------------------------------|--|
| ∇ | Operador Gradiente |
| $\nabla \cdot$ | Operador Divergente |
| $\frac{\partial}{\partial t}$ | Derivada parcial temporal |
| $\frac{d}{dt}$ | Derivada ordinária temporal |
| $\delta(t - t_0)$ | Operador delta de Kronecker |
| $\det(*)$ | Determinante do tensor $*$ |
| \int_D | Integral |
| $\frac{D}{Dt}$ | Derivada material |
| $\ \mathbf{u}\ $ | Norma ou módulo do vetor \mathbf{u} . |
| $\ d\mathbf{S}\ $ | Norma do elemento de área, $\ d\mathbf{S}\ = dS$. |
| $ x $ | Módulo do número real x |
| $\frac{\delta_{\pm}(*)}{\delta t}$ | Derivada Oldroyd Alta (-) ou Baixa (+) do tensor $*$ |
| I_* | Primeiro invariante do tensor $*$ |
| II_* | Segundo invariante do tensor $*$ |
| III_* | Terceiro invariante do tensor $*$ |
| $\overset{\circ}{\sigma}$ | Derivada de Gordon-Schowalter |
| $\Phi(\cdot)$ | Função relaxação de tensão |
| $E_{\square}(\varpi)$ | Espectro de potência da função \square |
| $\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}$ | Derivada de Jaumann |
| \mathbf{A}^T | Transposto do tensor \mathbf{A} |
| \mathbf{x}^T | Transposto do vetor \mathbf{x} |
| \ll | Bem menor que. Ex.: $0.1 \ll 1$. |
| \gg | Bem maior que |
| \lll | Bem menor que \ll . Ex.: $10^{-3} \lll 10^3$. |
| \ggg | Bem maior que \gg |
| \approx | Aproximadamente igual |
| \equiv | Identicamente |
| $\langle \diamond \rangle$ | Média da quantidade \diamond . No inglês “ <i>Ensemble Average</i> ” |
| \bar{f} | Média integral da quantidade $f = \frac{1}{T} \int_0^T f dt$ |

Outros símbolos

| | | |
|--------------------|---|----------------|
| F_e | Força de origem elástica | $[N]$ |
| F_b | Força devida ao movimento Browniano | $[N]$ |
| F_v | Força de origem viscosa | $[N]$ |
| C_v | Coefficiente de arrasto viscoso | $[Pa\ m\ s]$ |
| dt | Passo de tempo | $[s]$ |
| $\hat{\mathbf{n}}$ | Vetor normal unitário | |
| $\mathbf{A}^{(n)}$ | n -ésimo tensor de Rivlin-Erickson | |
| \mathbf{B} | Tensor conformação | $[m^2]$ |
| G | Constante de Mola ou elasticidade | $[kg\ s^{-2}]$ |
| p | Pressão | $[Pa]$ |
| R_T | Raio do tubo (fixo a priori) | $[m]$ |
| r | Raio (variável), em geral $0 < r \leq R_T$ | $[m]$ |
| C | Comprimento do tubo | $[m]$ |
| t' | Símbolo alternativo para tempo | $[s]$ |
| \mathbb{N} | Conjunto dos números naturais | |
| \mathbb{R} | Conjunto dos números reais | |
| x_i | Número real, $i = 1, 2, 3$ | |
| \mathbb{R}^3 | Espaço vetorial real | |
| \mathbf{e}_i | i -ésimo vetor canônico da base do espaço vetorial \mathbb{R}^3 | |
| \mathbf{x} | $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$. Vetor genérico em \mathbb{R}^3 | |
| $\exp(\cdot)$ | Função exponencial. Ex.: $y(x) = \exp(x) = e^x$ | |
| $tr(*)$ | Função traço do tensor * | |
| $\zeta(\cdot)$ | Função zeta de Riemann. Ex.: $\zeta(\alpha) = \sum_{k=1}^{+\infty} k^{-\alpha}$. | |
| \sim | Assintoticamente igual | |
| c.c. | Caso contrário | |
| \forall | Para todo | |
| \propto | Proporcionalidade | |
| $\mathcal{F}(*)$ | Função de um tensor * | |
| $\mathcal{O}(x^n)$ | Parâmetro x de orden $n \in \mathbb{N}$ | |

Grupos Adimensionais

| | |
|------------------|--------------------------------------|
| De | Número de Deborah |
| Re | Número de Reynolds |
| γ | Deformação |
| γ_0 | Deformação inicial |
| ϕ | Fração volumétrica |
| L | Extensibilidade |
| $\tilde{\omega}$ | Frequência adimensional |
| $d\tilde{t}$ | Passo de tempo adimensional |
| \tilde{G}_p | Gradiente de pressão adimensional |
| De_p | Número de Deborah avaliado na parede |

Siglas

| | |
|------------|--|
| S.I. | Sistema Internacional de Medidas |
| PAMA | Poliacrilamida aniônica |
| FNG | Fluido Newtoniano Generalizado |
| DFT | Transformada Discreta de Fourier, do inglês <i>Discret Fourier Transform</i> |
| MFI | Indiferença Material do Referencial, do inglês <i>Material Frame Indifference</i> . |
| <i>ppm</i> | Partes por milhão. |
| EDO | Equação diferencial ordinária |
| PVI | Problema de valor inicial |

Constantes Importantes

| | |
|--------------------------|--|
| $i = \sqrt{-1}$ | Unidade imaginária dos números complexos |
| $\varsigma = 0.57721566$ | Constante de Euler |
| $\pi = 3.14159265$ | Número pi |
| $e = 2.71828182$ | Número de Euler |

SUMÁRIO

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1 | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 2 |
| 1.2 | OBJETIVOS DO PRESENTE TRABALHO | 10 |
| 2 | FUNDAMENTOS DE VISCOELASTICIDADE | 12 |
| 2.1 | MOVIMENTO BROWNIANO | 18 |
| 2.2 | GERAÇÃO TEÓRICA DE UMA SUSPENSÃO E DE MACROMOLÉCULAS. | 20 |
| 2.3 | DESCRIÇÃO FENOMÉLOGICA DAS EQUAÇÕES CONSTITUTIVAS OU MATERIAIS | 26 |
| 2.3.1 | DESCRIÇÃO GERAL DE EQUAÇÕES CONSTITUTIVAS DE MATERIAIS SIMPLES | 27 |
| 2.4 | TENSORES DE CAUCHY-GREEN E RIVLIN-ERICKSON | 30 |
| 2.4.1 | EXPANSÃO DE RIVLIN-ERICKSON | 33 |
| 2.4.2 | FLUIDOS DE REINER-RIVILIN | 35 |
| 2.5 | MODELOS DE FLUIDOS NÃO-NEWTONIANO VISCOSOS | 37 |
| 2.6 | VISCOELASTICIDADE LINEAR | 39 |
| 2.7 | CISALHAMENTO SIMPLES | 40 |
| 2.8 | CISALHAMENTO OSCILATÓRIO | 41 |
| 2.9 | ESCOAMENTO EXTENSIONAL PERMANENTE | 44 |
| 2.10 | IMPULSO DE DEFORMAÇÃO APLICADA. | 46 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 2.11 | MODELO CONSTITUTIVO DE MAXWELL PARA VISCOELASTICIDADE LINEAR | 47 |
| 2.11.1 | GENERALIZAÇÃO DO MODELO DE MAXWELL | 52 |
| 2.11.2 | CÁLCULO DO η' E η'' PARA O MODELO GERAL DE MAXWELL | 56 |
| 2.12 | DETERMINAÇÃO DE σ E $\Phi(s)$: DOIS CASOS PARTICULARES | 58 |
| 2.13 | MODELO DE JEFFREY | 59 |
| 3 | UM POUCO DE REOLOGIA E ALGUNS RESULTADOS EXPERIMENTAIS | 61 |
| 3.1 | REÔMETRO | 62 |
| 3.1.1 | CÁLCULO DA VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DO TORQUE..... | 65 |
| 3.2 | CARACTERÍSTICAS DE UMA SUSPENSÃO POLIMÉRICA..... | 68 |
| 3.2.1 | SOLUÇÃO AQUOSA DE POLIACRILAMIDA ANIÔNICA-PAMA | 70 |
| 3.3 | RESULTADOS EXPERIMENTAIS..... | 71 |
| 3.3.1 | VARIAÇÃO DA VISCOSIDADE DE UMA SUSPENSÃO DE PAMA A FRAÇÃO VOLUMÉTRICA $\phi = 400 ppm$ | 74 |
| 3.3.2 | DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES VISCOELÁSTICAS DA PAMA COM A UTILIZAÇÃO DE UM CISALHAMENTO OSCILATÓRIO..... | 79 |
| 3.3.3 | RESULTADO PARA O ESCOAMENTO POR IMPULSO DE DEFORMAÇÃO.... | 85 |
| 4 | MODELAGEM MATEMÁTICA DE UMA SUSPENSÃO POLIMÉRICA..... | 88 |
| 4.1 | FLUIDO NEWTONIANO GENERALIZADO | 89 |
| 4.1.1 | FLUIDO VISCOELÁSTICO NÃO-LINEAR..... | 90 |
| 4.2 | MODELO OLDROYD-B | 91 |
| 4.2.1 | TENSOR DE TENSÕES NÃO-LINEAR E O TENSOR ADAPTAÇÃO B | 93 |
| 4.2.2 | MODELO NÃO-LINEAR DUMBELL-FENE..... | 97 |
| 4.2.3 | ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES..... | 99 |
| 5 | RESULTADOS ASSINTÓTICOS, NUMÉRICOS E COMPARAÇÃO COM ALGUNS RESULTADOS EXPERIMENTAIS – ESCOAMENTOS PERMANENTES..... | 100 |
| 5.1 | INTRODUÇÃO | 100 |
| 5.2 | CONVERGÊNCIA DOS DADOS NUMÉRICOS..... | 102 |
| 5.3 | CISALHAMENTO SIMPLES..... | 105 |
| 5.3.1 | SOLUÇÃO ASSINTÓTICA PARA $De \ll 1$ | 106 |
| 5.3.2 | O CRITÉRIO DA EQUIVALÊNCIA DE COX-MERZ..... | 109 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5.3.3 | COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS NUMÉRICOS E EXPERIMENTAIS PARA A DIFERENÇA DE TENSÕES NORMAIS N_1 | 111 |
| 5.3.4 | RESULTADO NUMÉRICO-EXPERIMENTAL DA MEDIÇÃO DA VISCOSIDADE DE UMA SUSPENSÃO DE PAMA. | 114 |
| 5.4 | FUNÇÃO $\Phi(s)$ PARA UM ESCOAMENTO DO TIPO IMPULSO DE DEFORMAÇÃO. | 117 |
| 5.5 | ESCOAMENTO EXTENSIONAL PERMANENTE | 120 |
| 5.5.1 | REGIME ELÁSTICO | 121 |
| 5.5.2 | REGIME ANISOTRÓPICO | 123 |
| 5.5.3 | RESULTADOS DA SOLUÇÃO NUMÉRICA DA VISCOSIDADE EXTENSIONAL E DO PARÂMETRO $R^2 = tr(\tilde{\mathbf{B}})$ | 125 |
| 6 | RESULTADOS ASSINTÓTICOS E NUMÉRICOS – ESCOAMENTOS TRANSIENTES | 132 |
| 6.1 | SUSPENSÃO POLIMÉRICA SUJEITA A ESCOAMENTO POR CISALHAMENTO OSCILATÓRIO | 132 |
| 6.1.1 | RESULTADOS NUMÉRICOS PARA $\tilde{\sigma}_{12}$ QUANDO ASSUME-SE A CONTRIBUIÇÃO VISCOSA E ELÁSTICA. | 138 |
| 6.1.2 | RESULTADOS NUMÉRICOS PARA $\tilde{\sigma}_{12}$ REFERENTE AO TERMO DE CONFORMAÇÃO DA MACROMOLÉCULA. | 143 |
| 6.1.3 | RESULTADOS NO DOMÍNIO DA FREQUÊNCIA $\tilde{\omega}$ | 148 |
| 6.1.4 | ESPECTROS DE POTÊNCIA DE $\tilde{\sigma}_{12}$ CONSIDERANDO A CONTRIBUIÇÃO VISCOSA E ELÁSTICA | 155 |
| 6.1.5 | ESPECTROS DE POTÊNCIA DE $\tilde{\sigma}_{12}$ CONSIDERANDO APENAS A CONTRIBUIÇÃO DO TERMO DE CONFORMAÇÃO DA MACROMOLÉCULA | 157 |
| 6.1.6 | RESULTADOS NUMÉRICOS PARA \tilde{N}_1 | 159 |
| 6.1.7 | FUNÇÃO RELAXAÇÃO DE TENSÃO $\Phi(s)$ NO REGIME VISCOELÁSTICO LINEAR E NÃO-LINEAR | 171 |
| 6.1.8 | VERIFICAÇÃO DAS RELAÇÕES DE KRAMERS-KRONIG (K-K) – PRINCÍPIO DA CAUSA-EFEITO | 175 |
| 6.2 | FRAÇÕES CONTINUADAS | 177 |
| 6.3 | ESCOAMENTO EXTENSIONAL OSCILATÓRIO | 181 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 6.3.1 | SOLUÇÃO ASSINTÓTICA PARA $De \ll 1$ | 182 |
| 6.3.2 | SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA $\tilde{\mu}_e$ NO CASO $De \geq 1$: DIAGRAMAS DE FASE E ESPECTROS DE POTÊNCIA. | 188 |
| 6.4 | RESPOSTA DO FLUIDO A UM ESCOAMENTO CISALHANTE OSCILATÓRIO APENAS COM TAXA DE ROTAÇÃO | 195 |
| 6.4.1 | SOLUÇÃO NO REGIME ASSINTÓTICO $De \ll 1$ | 196 |
| 6.4.2 | CONDIÇÃO PARA EFEITOS NÃO-NEWTONIANOS POR APENAS ROTAÇÃO EM $\tilde{\sigma}_{12}$ NO CISALHAMENTO SIMPLES OSCILATÓRIO | 199 |
| 7 | ESCOAMENTO EM TUBO CAPILAR DE UM FLUIDO OLDROYD-B..... | 202 |
| 7.1 | FORMULAÇÃO GERAL – ESCOAMENTOS UNIDIRECIONAIS AXISSIMÉTRICOS | 202 |
| 7.1.1 | CONDIÇÃO PARA A UNIDIRECIONALIDADE DO ESCOAMENTO EM TUBO – ANÁLISE DE ESCALAS | 206 |
| 7.1.2 | VISCOSIDADE NA PAREDE DO TUBO..... | 207 |
| 7.2 | ESCOAMENTO DE UM FLUIDO OLDROYD-B EM TUBO CAPILAR..... | 209 |
| 7.3 | PROCEDIMENTO NUMÉRICO E TESTES PRELIMINARES..... | 213 |
| 7.3.1 | ESCOAMENTO NA AUSÊNCIA DAS MACROMOLÉCULAS..... | 214 |
| 7.3.2 | RESULTADOS NUMÉRICOS COM A PRESENÇA DAS MACROMOLÉCULAS .. | 215 |
| 8 | CONCLUSÕES..... | 224 |
| 8.1 | SOBRE ALGUNS RESULTADOS | 224 |
| 8.2 | POSSÍVEIS TRABALHOS FUTUROS | 230 |
| | APÊNDICES | 238 |
| I | PROPRIEDADES VETORIAIS..... | 239 |
| I.1 | LEI DE TRANSFORMAÇÕES DE VETORES E TENSORES..... | 240 |
| I.2 | POLINÔNIO CARACTERÍSTICO E O TEOREMA DE CAYLEY-HAMILTON.. | 243 |
| I.3 | DECOMPOSIÇÃO POLAR DE UM TENSOR..... | 246 |
| I.4 | PRODUTO DIÁDICO | 248 |
| II | TENSOR DE TENSÕES E EQUAÇÕES GOVERNANTES PARA ESCOAMENTO DE UM FLUIDO..... | 249 |
| II.1 | EQUAÇÕES EM COORDENADAS CILÍNDRICAS..... | 253 |

| | |
|---|------------|
| III OBJETIVIDADE DO TENSOR D E DERIVADAS OLDROYD | 256 |
| III.1 DERIVADAS TEMPORAIS DE JAUMAN E OLDROYD | 257 |
| III.2 OBJETIVIDADE DAS DERIVADAS TEMPORAIS DE JAUMAN E OLDROYD | 261 |
| IV MÉTODOS DE RUNGE KUTTA..... | 264 |
| IV.1 BREVE ESTUDO SOBRE O MÉTODO DE QUADRATURA | 264 |
| IV.1.1 METÓDO DE RUNGE-KUTTA DE ν ESTÁGIOS..... | 268 |
| V ALGORITMO DAS FRAÇÕES CONTINUADAS..... | 272 |
| VI UM EXEMPLO DE ESCOAMENTO CAPILAR | 274 |

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

É enorme o uso de produtos de origem polimérica pela sociedade moderna, por exemplo nas indústrias alimentícias e farmacêuticas, e a tendência é que sua utilização cresça ainda mais, isto porque os polímeros sintéticos estão cada vez substituindo materiais convencionais como metais e madeira, devido, principalmente ao seu menor custo, facilidade de processamento e propriedades físicas e mecânicas adequadas. Materiais bem distintos podem ser obtidos utilizando-se diferentes polímeros, por exemplo, o plástico utilizado na fabricação de sacolas e o plástico que reveste televisores, monitores de computador ou os usados em automóveis. Por estes e outros motivos torna-se importante o estudo das propriedades dos polímeros.

Todo o contingente de produtos de origem polimérica passa anteriormente por algum tipo de processo de transformação, ou seja, operações que transformam a matéria prima em produtos finais para consumo. Só para citar alguns exemplos destes processos de transformações tem-se: a extrusão, moldagem por injeção, moldagem por sopro, termomoldagem, entre outros. O que há de comum na maioria destes processos, é uma etapa na qual o material, originalmente no estado sólido, é fundido possibilitando assim que tome uma nova forma desejada [10].

Para o estudo, avaliação e entendimento de qualquer processo no qual o escoamento de

um fluido polimérico seja analisado é de fundamental importância conhecer seu comportamento (seja de forma experimental e/ou empírica) e em muitos casos saber representá-lo de uma forma quantitativa por meio de equações matemáticas. A escolha de uma equação matemática (ou sistema de equações) que represente de forma mais fiel possível à realidade, requer que sejam considerados: o tipo de escoamento, o fluido a ser estudado e em que condições serão analisadas as propriedades reológicas específicas da estrutura interna do mesmo e etc. Exemplos de situações nas quais isto ocorre é na caracterização de polímeros pela obtenção de medidas reológicas e na modelagem, simulação e otimização de processos que envolvam o escoamento de fluidos poliméricos [8].

Polímeros são materiais que costumam apresentar comportamento variado. Vários tipos de classificação, por exemplo, são apresentados nas literaturas, como pode ser visto em [13],[12]. Possuem vários tipos de estruturas, podendo ser totalmente desordenados como em elastômeros ou possuírem cadeias que se arranjam de forma cristalina, semelhante aos metais [8]. Além disso, são muito sensíveis a temperatura, pressão, taxa de deformação, dentre outros fatores. E ademais, existem parâmetros que não fazem sentido para certos tipos de polímeros, como pode ser visto em [47]. Por tudo isso, uma caracterização de polímeros se torna muito difícil.

1.1 Revisão Bibliográfica

Existe um grande número de formulações constitutivas, que buscam descrever o comportamento reológico dos fluidos poliméricos. Estas equações podem ser classificadas em diferentes grupos, de acordo com a sua forma, sua natureza matemática e sua capacidade de predição de funções materiais [8]. Cita-se, inicialmente, o Fluido Newtoniano Generalizado (FNG), este consiste na generalização do modelo de fluido newtoniano para fluidos nos quais a viscosidade é uma função da magnitude do tensor taxa de deformação \mathbf{D} . Os modelos FNG são uma primeira generalização da mecânica dos fluidos clássica para a mecânica dos fluidos não-newtonianos [8],[9],[4].

O modelo matemático Oldroyd-B é apresentado na equação (1.1). Este modelo surgiu

da teoria cinética para soluções poliméricas concentradas e polímeros fundidos [8].

$$\boldsymbol{\sigma} + \tau_p \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = 2\mu\mathbf{D}, \quad (1.1)$$

em que τ_p é o tempo de relaxação principal da suspensão polimérica de viscosidade μ . Onde μ é determinada à taxa de deformação aproximadamente nula. O símbolo $\delta_-(\boldsymbol{\sigma})/\delta t$ denota a derivada oldroyd alta do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ (ver apêndice (III)). Este modelo produz valores constantes da viscosidade de cisalhamento em relação à taxa de deformação, estima a primeira diferença de tensões normais $N_1 = \sigma_{11} - \sigma_{22}$ como sendo uma função quadrática da taxa de cisalhamento [4] e fornece a segunda diferença de tensões normais nula, isto é, $N_2 = \sigma_{22} - \sigma_{33} = 0$. O modelo Oldroyd-B consegue representar de maneira satisfatória certos tipos de fluidos que apresentam elasticidade ideal, também conhecidos como fluidos de “*Boger*” [8].

Para escoamentos extensionais o modelo Oldroyd-B possui a deficiência de calcular uma viscosidade extensional infinita para valores de taxa de deformação em que $(2\dot{\epsilon}\tau) > 1$, em que τ é o maior tempo de relaxação do espectro de relaxação e $\dot{\epsilon}$ é a taxa de deformação (ou estiramento) imposta [8].

Na equação de Cauchy (ver apêndice (II)) é comum escrever o campo de tensões como sendo a soma das tensões devido ao solvente (fluido base) e da presença das macromoléculas, dessa maneira:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \rho\mathbf{b} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_s + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m, \quad (1.2)$$

em que ρ é a massa específica do fluido, \mathbf{u} campo de velocidade, $\boldsymbol{\sigma}_s$ é o campo de tensões devido ao solvente e $\boldsymbol{\sigma}_m$ campo de tensões devido a presença das macromoléculas, \mathbf{b} denota uma força por unidade de massa ou forças de campo. Se tomarmos a viscosidade do solvente como sendo praticamente nula, ou desprezar a contribuição do solvente, o modelo Oldroyd-B recai em um modelo também muito conhecido chamado de UCM (*Upper Convected Maxwell*) [8],[45]. Este modelo UCM é muito usado para testar/validar metodologias numéricas, uma vez que a ausência da parte correspondente à viscosidade do solvente torna mais crítica a estabilidade numérica do problema.

Para se conseguir uma melhor representação dos dados experimentais existe uma classe de modelos similares ao Oldroyd-B [8], mas que consideram que μ e τ são funções do segundo invariante do tensor taxa de deformação \mathbf{D} , dado por $II_{\mathbf{D}} = \dot{\gamma} = \sqrt{2\mathbf{D}:\mathbf{D}}$. Neste

caso a viscosidade $\mu(II_{\mathbf{D}})$ e o maior tempo de relaxação $\tau(II_{\mathbf{D}})$ podem ser representados por diferentes relações. Um modelo deste tipo é o White-Metzner (WM) [41], que é dado pela equação:

$$\boldsymbol{\sigma} + \tau(II_{\mathbf{D}}) \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = 2\mu(II_{\mathbf{D}})\mathbf{D}, \quad (1.3)$$

sendo que na equação (1.3) tem-se as seguintes relações de dependência para a viscosidade polimérica e tempo de relaxação dados por:

$$\mu(II_{\mathbf{D}}) = \frac{\mu_0}{1 + a\tau_0 II_{\mathbf{D}}} \text{ e } \tau(II_{\mathbf{D}}) = \frac{\tau_0}{1 + a\tau_0 II_{\mathbf{D}}}, \quad (1.4)$$

em que os parâmetros μ_0 e τ_0 são constantes obtidos do modelo de Maxwell e a é um parâmetro que deve ser ajustado aos dados experimentais e que pode dar maior ou menor dependência entre a viscosidade polimérica e o tempo de relaxação em relação ao segundo invariante de \mathbf{D} .

Outras relações encontradas na literatura são o modelo de Cross [40] e aqui μ e τ são dados por

$$\mu(II_{\mathbf{D}}) = \frac{\mu_0}{1 + (kII_{\mathbf{D}})^{1-m}} \text{ e } \tau(II_{\mathbf{D}}) = \frac{\tau_0}{1 + (\ell II_{\mathbf{D}})^{1-n}}, \quad (1.5)$$

e também o modelo de Carreau-Yasuda [14],[64], em que tem-se:

$$\mu(II_{\mathbf{D}}) = \mu_0 \left[1 + (kII_{\mathbf{D}})^a \right]^{\frac{m-1}{a}} \text{ e } \tau(II_{\mathbf{D}}) = \tau_0 \left[1 + (\ell II_{\mathbf{D}})^b \right]^{\frac{n-1}{b}}, \quad (1.6)$$

os parâmetros k, ℓ, m, n, a e b são obtidos pelo ajuste (fit) dos dados experimentais. Os parâmetros k e ℓ são os tempos característicos do fluido para uma taxa de cisalhamento praticamente nula, i.e., $\dot{\gamma}_0 \approx 0$, e desta forma obtém-se o tempo de relaxação inicial τ_0 para $\dot{\gamma} \approx 0$. O parâmetro n é o expoente do modelo power-law (ver seção (2.5)) e o parâmetro adimensional a descreve a região de transição entre a região para a taxa de cisalhamento muito baixa e a região power-law. Alguns exemplos de gráficos de ajustes de curvas de dados experimentais podem ser visto em [8].

Tem-se ainda o modelo de Giesekus (1982) [29], [8], esse modelo é baseado em considerações moleculares com sistemas do tipo esfera/mola em que a mola segue a lei de Hooke. Diferentemente do modelo Oldroyd-B, neste modelo foi introduzido um efeito de não-isotropia na definição da força de arrasto sobre as esferas. Na equação (1.7) mostra-se este modelo no qual observa-se a presença do termo não linear dado pelo produto entre o

tensor de tensões,

$$\boldsymbol{\sigma} + \tau \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} + \alpha \frac{\mu}{\tau} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = 2\mu \mathbf{D}, \quad (1.7)$$

a constante α é chamada de constante de mobilidade e está associada com o movimento browniano e ao arrasto hidrodinâmico anisotrópico das moléculas de polímero no meio [8]. A inclusão do termo não linear produz uma variação das propriedades cisalhantes frente à taxa de deformação. Com este modelo se obtém melhores resultados para escoamentos por cisalhamento quando comparado ao modelo Oldroyd-B, porém, não traz bons resultados em escoamentos livres de cisalhamento [8],[45],[55]. Em um escoamento extensional uniaxial, o modelo de Giesekus mostra um comportamento monotônico da evolução da viscosidade extensional em função do tempo para altos valores da taxa de deformação, levando a patamares permanentes e finitos da viscosidade extensional uma vez atingido o estado permanente. Pode-se observar que o modelo de Giesekus reduz-se ao modelo Oldroyd-B no limite de pequenas deformações, o que é equivalente a fazer $\alpha = 0$ na equação (1.7). Ao considerar $0 < \alpha \leq 2$ este modelo conduz a segunda diferença de tensões normais $N_2 \neq 0$, porém, previsões fisicamente coerentes são observadas com $0 \leq \alpha \leq 1/2$ [8]. Para $0 < \alpha < 1$ e para altos valores da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$, o modelo prediz a viscosidade de cisalhamento escalando com o próprio $\dot{\gamma}$ e a primeira diferença de tensões normais é tal que $N_1 \propto \dot{\gamma}^{1/2}$ [29].

A título de ilustração apresenta-se em (1.8) e (1.9) a equação constitutiva de Lenov [41] para propriedades variáveis

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\sigma} - \frac{\mu}{\tau} \mathbf{I}, \quad (1.8)$$

em que o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ é obtido resolvendo-se a equação (1.9) abaixo

$$\frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} + \frac{1}{2\mu} \left\{ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \left(\frac{\mu}{\tau} \right)^2 \mathbf{I} - \frac{1}{3} \left[\text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) - \left(\frac{\mu}{\tau} \right)^2 \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}^{-1}) \right] \boldsymbol{\sigma} \right\} = 0, \quad (1.9)$$

e \mathbf{I} é o tensor isotrópico identidade. Para deformações incompressíveis e planas a equação de Lenov pode ser simplificada da seguinte maneira

$$\boldsymbol{\Sigma} + \tau \frac{\delta_-(\boldsymbol{\Sigma})}{\delta t} + \frac{1}{2} \frac{\mu}{\tau} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) = 2\mu \mathbf{D}, \quad (1.10)$$

esta última equação representa um caso particular de equação de Giesekus com $\alpha = 1/2$ [41].

O modelo de mola linear de Hooke tem a deficiência da macromolécula se deformar indefinidamente sem qualquer restrição. Por este motivo muitos modelos constitutivos de fluidos viscoelásticos passaram a se basear em descrições de molas não lineares nas quais uma restrição de deformação máxima L^2 é imposta. Estes modelos são chamados de “*Dumbbell-FENE*” (*Finitely Extensible Nonlinear Elastic*) [62]. A partir do modelo original conhecido como *FENE*, diversas derivações foram apresentadas posteriormente, como por exemplo, o “*FENE-P*” (*Finitely Extensible Nonlinear Elastic-Peterlin*) [8] e o “*FENE-CR*” (*Finitely Extensible Nonlinear Elastic-Chilcott and Rallison*) [15] entre muitos outros métodos que não serão tratados neste trabalho e que podem ser vistos em [43]. Mostra-se, na equação (1.11), o modelo *FENE-P* a título de ilustração.

$$\left(1 + \frac{\frac{3}{1-3/L^2} + \frac{\tau \text{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{\mu}}{L^2} \right) \boldsymbol{\sigma} + \tau \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = 2 \left(\frac{1}{1-3/L^2} \right) \mu \mathbf{D}, \quad (1.11)$$

em que L é extensibilidade máxima da macromolécula, τ o tempo de relaxação e μ a viscosidade da suspensão polimérica.

Embora o modelo dado pela equação (1.11) tenha sido desenvolvido para soluções diluídas com concentração volumétrica $\phi \ll 1\%$, (portando interações entre as macromoléculas podem ser desprezadas) existem modificações levando em conta o efeito de aglomeração das macromoléculas em soluções mais concentradas [34]. Pode-se ainda citar que este modelo apresenta a relação $N_1 \propto \dot{\gamma}^{2/3}$ e $N_2 = 0$, no caso de um fluido viscoelástico ideal sob a ação de um escoamento por cisalhamento simples, para altos valores de $\dot{\gamma}$ [44].

Em [66], tem-se uma análise de diversos problemas analíticos e numéricos do modelo *FENE* e *FENE-P* para fluidos poliméricos. Mostrou-se que o modelo *FENE-P* tem a vantagem de poder reproduzir mais fielmente o comportamento quantitativo do modelo *FENE*, para taxas moderadas de cisalhamento e extensão. E que este primeiro modelo se torna instável para grandes taxas de cisalhamento e extensão. Determinou-se ainda que na análise de estabilidade do modelo fechado *FENE-P* a solução do estado permanente torna-se ainda mais estável à medida que a taxa de cisalhamento ou extensão aumenta.

O modelo *FENE-CR* é mostrado na equação (1.12)

$$\left(\frac{L^2 + \frac{\tau \text{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{\mu}}{L^2 - 3} \right) \boldsymbol{\sigma} + \tau \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = 2 \left(\frac{L^2 + \frac{\tau \text{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{\mu}}{L^2 - 3} \right) \mu \mathbf{D}. \quad (1.12)$$

O parâmetro L^2 dos dois modelos representa a extensibilidade adimensional do polímero, como se vê adiante na seção (4.2.2). Este modelo reduz-se à conhecida equação Oldroyd-B, equação (1.1), quando L^2 tende ao infinito. Note que este modelo é baseado ainda no modelo *FENE-P*, embora a dependência da viscosidade de cisalhamento com a taxa de deformação é eliminada com o objetivo de se caracterizar um tipo de polímero, conhecido como fluido de Boger. Para um escoamento de cisalhamento simples, os modelos *FENE* e *FENE-P* mostraram resultados similares em termos da viscosidade de cisalhamento μ e do coeficiente da primeira diferença de tensões normais Ψ_1 , ambos em função do parâmetro adimensional $\dot{\gamma}\tau$, em que τ é um parâmetro relacionado ao tempo de relaxação do polímero. O modelo *FENE-CR* considera μ constante em relação a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ e um decaimento mais lento para Ψ_1 . Comparações entre diferentes versões de modelos do tipo *FENE* podem ser encontradas em [34],[67],[43].

Existem vários modelos constitutivos baseados no tensor conformação \mathbf{B} da macromolécula [30];[31],[39]. Em [39], investiga-se a conformação molecular das macromoléculas de um polímero usando medidas macroscópicas da viscosidade extensional através da expressão dada pela teoria de Batchelor [5] de corpos delgados, que considera as macromoléculas deformadas como fibras rígidas. Os resultados obtidos com a teoria de Batchelor mostraram valores da viscosidade extensional maiores do que os obtidos experimentalmente. James et al. [39], acreditam que esta diferença possa ser atribuída ao fato das macromoléculas não atingirem a sua deformação máxima, devido a formação de aglomerações das mesmas.

É importante ressaltar que o processo para se obter uma equação constitutiva baseado em modelos do tipo esfera-mola (*Dumbbell*) passa pela solução da equação de Smoluchowski [8] para uma função de distribuição $\varphi(\mathbf{r}, t)$, em que \mathbf{r} é o vetor que “liga” as extremidades da macromolécula. Porém como foi visto acima e em [41], vários destes modelos podem ser resolvidos em termos da tensão sem necessidade de se envolver a função distribuição $\varphi(\mathbf{r}, t)$. Menciona-se ainda o fato de que a inclusão do termo de limitação de extensibilidade L^2 , impõe dificuldades para se obter uma forma fechada (sistema de equações acopladas) para as equações constitutivas em termos da função distribuição $\varphi(\mathbf{r}, t)$ [8],[32].

Apresenta-se, agora, o modelo *Phan-Thien-Tanner-PTT*, este é usado em simulações numéricas de fluidos viscoelásticos [59]. Este modelo é derivado da teoria de rede de soluções concentradas e polímeros fundidos [8]. Este modelo *PTT* pode ser apresentado de diferentes

formas: a primeira delas é o *PTT*-linear, descrito na equação (1.13)

$$\left(1 + \frac{\varepsilon\tau}{\mu}tr(\boldsymbol{\sigma})\right)\boldsymbol{\sigma} + \tau\dot{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu\mathbf{D}. \quad (1.13)$$

E o *PTT*-exponencial é descrito na equação (1.14) abaixo:

$$\exp\left(\frac{\varepsilon\tau}{\mu}tr(\boldsymbol{\sigma})\right)\boldsymbol{\sigma} + \tau\dot{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu\mathbf{D}, \quad (1.14)$$

em que,

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} - (\nabla\mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\mathbf{u} + \xi(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (1.15)$$

denota a derivada de Gordon-Schowalter e o traço de $\boldsymbol{\sigma}$, $tr(\boldsymbol{\sigma})$, leva em conta a energia elástica da rede. Se considera-se a derivada Oldroyd alta, ao invés da derivada de Gordon-Schowalter tem-se os modelos de *PTT* simplificados. Nestas expressões, ε é um parâmetro do modelo relacionado com as suas propriedades extensionais. Quando um filamento do fluido é estirado axialmente, a oposição ao estiramento é tanto maior quanto menor for ε , isto é, um ε maior corresponde a um fluido com uma viscosidade extensional menor. Do ponto de vista numérico uma solução é mais facilmente conseguida quando os fluidos apresentam um ε maior, porém tem-se $\varepsilon < 1$. O parâmetro ξ relaciona as diferenças de tensões normais e, geralmente é usado um valor próximo de 0.2.

Vem sendo proposta uma nova classe de modelos constitutivos viscoelásticos que incorporam uma maior flexibilidade. Estes modelos fazem com que a viscosidade μ e o tempo de relaxação τ sejam funções do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$, assim estas grandezas são calculadas por alguma função que relaciona o tensor. Um modelo que usa essas ideias é o modelo *Feta-PTT* (*Fixed eta Phan-Thien-Tanner*) e a expressão “Fixed eta” refere-se a viscosidade fixa pela equação (1.17) e assim não depende do parâmetro não linear ε . Esse modelo é similar ao *PTT*, com a diferença que considera a viscosidade e o tempo de relaxação dependentes da tensão [61], assim tem-se a equação:

$$\left(1 + \frac{\varepsilon\tau(\boldsymbol{\sigma})}{\mu}tr(\boldsymbol{\sigma})\right)\boldsymbol{\sigma} + \tau(\boldsymbol{\sigma})\dot{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu(\boldsymbol{\sigma})\mathbf{D}, \quad (1.16)$$

na qual $\mu(\boldsymbol{\sigma})$ e $\tau(\boldsymbol{\sigma})$ são calculados pelas equações (1.17) e (1.18)

$$\mu(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\mu_0}{\left[1 + A\left(\frac{II_{\boldsymbol{\sigma}}\tau_0}{\mu_0}\right)^a\right]^b}, \quad (1.17)$$

e

$$\tau(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\tau_0}{1 + \frac{\varepsilon \tau_0 I_{\boldsymbol{\sigma}}}{\mu_0}}, \quad (1.18)$$

e por fim os termos $I_{\boldsymbol{\sigma}}$ e $II_{\boldsymbol{\sigma}}$ são os primeiro e segundo invariantes do tensor $\boldsymbol{\sigma}$, dados respectivamente por:

$$I_{\boldsymbol{\sigma}} = \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \text{ e } II_{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{2}[I_{\boldsymbol{\sigma}}^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma})]. \quad (1.19)$$

Os termos τ_0 e μ_0 são os parâmetros lineares obtidos do modelo de Maxwell e A, a e b são parâmetros do modelo de Ellis [56]. Vale mencionar que neste modelo *Feta-PTT* a viscosidade extensional é um pouco mais sensível às variações do parâmetro ε , se comparada com o primeiro coeficiente de tensões normais. Como resultado, propriedades viscosas e extensionais podem ser controladas de forma mais independente [61].

Digno de nota pode-se citar, finalmente, o resultado mais no âmbito matemático-teórico, que foi a prova da existência de soluções fracas globais no tempo para uma classe geral de modelos que surgem a partir da teoria cinética de suspensões diluídas de líquidos poliméricos não homogêneos, em que as macromoléculas do polímero foram idealizadas como no modelo *Dumbbell-FENE* [57].

A tabela (1.1) traz um resumo dos modelos apresentados nesta introdução onde destaca-se as vantagens de cada modelo.

Tabela 1.1: Modelos de equações constitutivas e suas vantagens.

| MODELO | EQUAÇÃO | VANTAGENS |
|-----------------|---------|--|
| Oldroyd-B | (1.1) | Fornece $N_1 = A\dot{\gamma}^2$.E representa bem os fluidos de Boger |
| White-Metzner | (1.3) | Do Oldroyd-B e ainda melhora o ajuste de dados experimentais |
| Giesekus | (1.7) | Produz $N_2 \neq 0$. Melhor resultados com relação ao Oldroyd-B |
| Dumbbell-Fene-P | (1.11) | Restringe o estiramento das macromoléculas |
| PTT | (1.13) | Estudo de fluidos viscoelásticos em escoamentos extensionais |
| Feta-PTT | (1.16) | Do PTT. Considera fixa a viscosidade. Melhor controle de propriedades viscosas e extensionais |

1.2 Objetivos do presente trabalho

GERAL

- O presente trabalho tem como principal objetivo o estudo do surgimento dos efeitos não-lineares quando na caracterização de suspensões diluídas de polímeros sujeitos a diferentes campos de escoamento. Para isso será determinado o limite assintótico para $De \ll 1$ para quase todos os escoamentos aqui tratados. E quando oportuno será feito a validação/calibração do modelo teórico matemático, através dos dados experimentais obtidos no capítulo 3.

ESPECÍFICOS

1. Apresentar o modelo constitutivo de duas equações para fluidos elásticos. Onde o balanço entre forças viscosas e elásticas é considerado. E apresentar uma nova proposta de adimensionalização destas equações;
2. Para cisalhamento oscilatório, determinar o módulo viscoso $\eta'(\omega)$ e o módulo elástico $G'(\omega)$, em que ω é a frequência. Determinar G' e η' no limite de $\omega \rightarrow 0$ em função da deformação γ (“strain”). Verificar as relações de Kramers-Kronig e determinar a função relaxação de tensões Φ (“stress relaxation function”) pela Transformada de Fourier seno e cosseno. Verificar se essa função relaxação de tensões pode ser descrita como um fluido de Maxwell (decaimento exponencial). Determinar a diferença de tensões normais N_1 e N_2 em $\omega = 0$ (cisalhamento permanente);
3. Usar o algoritmo experimental de fração continuada e desenvolver um programa computacional para sempre ajustar os dados numéricos e experimentais de η' e η'' (ou G' e G'').
4. Explorar escoamento do passo de deformação aplicada (“step strain”) numericamente para determinar a função de relaxação de tensões e comparar com a Φ determinada por transformada de Fourier no caso do cisalhamento oscilatório;
5. Desenvolver soluções assintóticas do sistema de equações constitutivas que surgirá, para se determinar propriedades reológicas do fluido;

6. Resolver o sistema de EDO's que surgirá através da integração numérica, utilizando-se do método de Runge-kutta de quarta ordem. Para isto será desenvolvido um código matemático-numérico em linguagem de programação FORTRAN;
7. Explorar o escoamento extensional permanente e oscilatório para analisar o comportamento da viscosidade extensional $\tilde{\mu}_e$ e da variação do termo R , ambos em função do tempo e do número de Deborah.
8. Realizar experimentos de cisalhamento permanente, oscilatório e passo de deformação aplicada, no reômetro MCR-301 com a finalidade de obter os mesmos dados reológicos acima descritos (2 e 3) e validar/calibrar o modelo matemático teórico. Vale mencionar que todos os testes serão feitos a temperatura ambiente de $20^\circ C$;
9. Determinar uma nova equação de evolução temporal para o tensor conformação \mathbf{B} , utilizando-se da derivada de Jauman (apêndice (III)) e resolver o sistema de EDO's resultante, para o cisalhamento oscilatório, usando-se do processo de transformação modal [50].
10. Apresentar a formulação geral de escoamentos axissimétricos (r, θ, z) em tubos capilares em termos da equação de Cauchy e implementar o modelo de escoamento axissimétrico do fluido Dumbel. Mostrar o desvio do perfil parabólico da velocidade com o aumento de De e determinar a variação da viscosidade efetiva $\tilde{\mu}_s$ da suspensão polimérica em função de De e determinar, também, a variação da viscosidade de parede $\tilde{\mu}_p$ em função da taxa de cisalhamento na parede, que no nosso caso trata-se do número de Deborah na parede De_p .

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS DE VISCOELASTICIDADE

A reologia é a ciência que estuda a deformação e o escoamento da matéria. Ela tem especial interesse no estudo das relações fundamentais entre força e deformação no material, em especial líquidos. Essas relações são denominadas equações constitutivas ou equações reológicas de estado [8].

As equações constitutivas caracterizam cada tipo de material, descrevendo o comportamento macroscópico resultante da sua constituição interna. Não existe uma equação constitutiva que forneça todas as respostas experimentais de um dado material. Entretanto, a maioria dos materiais possuem comportamento que oscila entre dois extremos bem definidos que são: (a) o sólido ideal, que obedece a lei de Hooke. Neste caso, os tensores de tensão e deformação estão relacionados de forma linear e a função material que caracteriza estes materiais é o módulo de Young ou, simplesmente, módulo elástico, que define a proporcionalidade entre tensão e deformação; (b) e o fluido ideal newtoniano incompressível, determinado pela lei de viscosidade de Newton. Este fluido caracteriza-se por viscosidade constante, pois as observações de Isaac Newton levaram a uma relação linear entre tensão de cisalhamento e taxa de cisalhamento. A razão entre estas quantidades é designada por

viscosidade, e escreve-se:

$$\eta = \frac{\sigma}{\dot{\gamma}}, \quad (2.1)$$

em que, $\dot{\gamma} = \frac{du}{dy}$, u é a velocidade na direção do escoamento e y é a direção normal ao escoamento (direção do gradiente de velocidade). A tensão de cisalhamento σ possui unidade no S.I. de N/m^2 , ou pascal Pa . A taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ tem unidade de s^{-1} , assim a unidade para viscosidade é $Pa\ s$. No entanto é comum encontrar a viscosidade em *Poise* (sistema de unidade CGS), em homenagem ao cientista Poiseuille. A relação entre estas medidas é apenas um fator escalar, a saber, $1\ cent\ Poise = 1\ cP = 1\ mPa\ s = 10^{-3}\ Pa\ s$, sendo este valor igual a viscosidade da água. Como exemplo de fluídos Newtonianos pode-se citar: água, glicerina, ar, óleo lubrificante de motores automotivos e mel. Em geral materiais compostos por moléculas de baixa massa molar (menor que 1000) são exemplos típicos de materiais que apresentam este comportamento Newtoniano.

Na figura (2.1) tem-se a representação esquemática da ação do escoamento por cisalhamento simples, que possui o campo de velocidade igual a $\mathbf{u} = (\dot{\gamma}x_2, 0, 0)$. Aqui são representadas a soma dos efeitos de deformação (no inglês “*stretching*”) e de rotação.

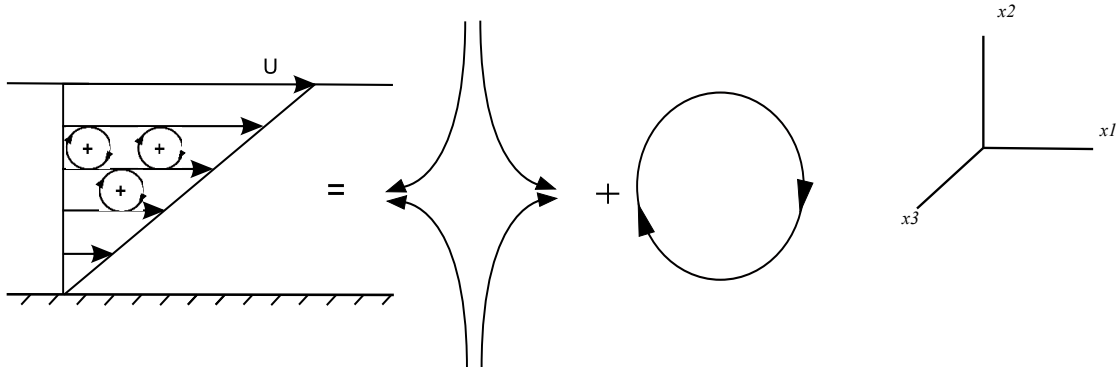


Figura 2.1: Escoamento em cisalhamento simples representado pela adição dos efeitos de deformação e de rotação. Fonte: [23].

O efeito de deformação é dado pelo tensor taxa de deformação, o qual é definido por:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T), \quad (2.2)$$

e o tensor taxa de rotação é definido por

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} - (\nabla\mathbf{u})^T), \quad (2.3)$$

nos dois casos, T , denota o transposto do tensor $\nabla \mathbf{u}$. Estes tensores são respectivamente a parte simétrica e antissimétrica do tensor gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u}$. É claro que, deste modo, tem-se $\nabla \mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$. Explicita-se o tensor $\nabla \mathbf{u}$ no caso geral em que $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (u_1(\mathbf{x}), u_2(\mathbf{x}), u_3(\mathbf{x}))$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Segue:

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Pode-se citar ainda os fluidos puramente viscosos não-Newtonianos que apresentam respostas puramente viscosas, mas que não apresentam uma relação linear entre tensão e taxa de deformação. Enquadram-se nesta classificação materiais que apresentam tensão mínima de escoamento e materiais com viscosidade dependente do tempo e/ou da taxa de deformação. Para descrever a dinâmica do escoamento deste tipo de material é necessária uma equação constitutiva específica para a viscosidade ou tensão, a qual é geralmente explícita em termos da taxa de deformação, de maneira que o número de incógnitas do problema não é alterado com relação ao necessário para se resolver o escoamento de um fluido Newtoniano.

Esses modelos constitutivos representam casos ideais. Entretanto, existem materiais que possuem características tanto de materiais sólidos quanto de materiais líquidos. Essa propriedade é conhecida como viscoelasticidade. Materiais como sangue, tintas e líquidos poliméricos apresentam esse comportamento viscoelástico. Em particular, os fluidos poliméricos são de grande interesse em processos industriais, dada a sua grande aplicabilidade. Esses fluidos são constituídos por macromoléculas com elevado peso molecular, levando ao aparecimento de comportamentos peculiares quando sujeitos a determinadas solicitações. As características não-newtonianas mais comuns são que a tensão é função não linear da taxa de deformação, a produção de tensões normais em cisalhamento e comportamento elástico e viscoso. Para descrever a dinâmica do escoamento deste tipo de material é necessária uma equação constitutiva adicional para o campo de tensões, sendo que as componentes de tensão aparecem como incógnitas adicionais com relação àquelas consideradas na análise de escoamentos de fluidos Newtonianos.

Diferentemente dos fluidos newtonianos incompressíveis, nos fluidos poliméricos propriedades do material como a viscosidade podem não ser constantes e poderão depender também da taxa de cisalhamento e do tempo, dentre outros fatores. O conhecimento dessas funções materiais é de extrema importância pois servem para classificar os fluidos e podem ser usadas para determinar constantes em equações constitutivas específicas.

Em geral todos os fluidos podem ser considerados fluidos viscoelásticos, o que significa a existência simultânea de propriedades viscosas e elásticas coexistindo no fluido. Em muitas situações o estudo dos fluidos tem se focado na resposta viscosa à aplicação de uma determinada excitação. Entretanto, quando a descrição mais geral na qual o estudo transiente de um fenômeno é necessária a resposta elástica torna-se importante. A resposta de um fluido uma vez aplicada uma excitação depende da escala de tempo do experimento em relação ao tempo característico do material, em consequência disto se o experimento é relativamente lento, o fluido terá uma resposta mais viscosa do que elástica. Porém, se o experimento é relativamente rápido a resposta terá características puramente elásticas. Em tempos intermediários ambas as características podem ser vistas no fluido. Dessa forma é necessário um estudo mais completo do comportamento viscoelástico de um fluido.

As características desse tipo de fluido pode ser vista em experimentos em [8]. Um desses experimentos consiste em submeter um fluido polimérico a uma taxa de deformação constante até o estado estacionário ser atingido, e então, em um dado instante, cessar o movimento. A resposta obtida para fluidos newtonianos é que a tensão cairia instantaneamente a zero. Porém, para fluidos poliméricos (ou viscoelásticos) observa-se que a tensão terá um valor finito e decairá exponencialmente com o tempo, apresentando o que é conhecido como memória elástica. Esta tensão residual é causada pelo estiramento e alinhamento das macromoléculas poliméricas pela força de deformação aplicada. Assim, para fluidos poliméricos, o tempo necessário para a tensão se dissipar é definido pelo tempo de relaxação das macromoléculas.

A figura (2.2) mostra o efeito conhecido como inchamento do extrudado (no inglês “*die swell*”) no qual a seção vertical do escoamento aumenta em tamanho após a saída da matriz, devido a elasticidade do fluido [8]. No experimento ilustrado na figura (2.2) considera-se um fluido que sai de um capilar com diâmetro D para o ar, formando um jato com diâmetro D_e . Para fluidos newtonianos D_e pode variar em 13% a mais do diâmetro D no caso de

baixos números de Reynolds ou 13% para menos de D quando se tem números de Reynolds maiores, porém ainda em escoamento laminar. Já para o caso de fluidos poliméricos o valor de D_e pode aumentar em mais de 300% em relação ao valor de D .¹

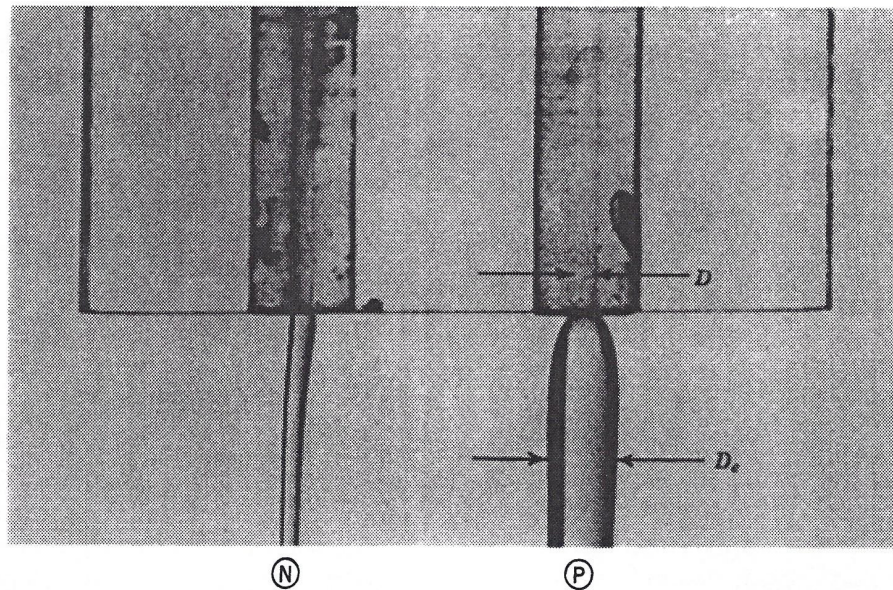
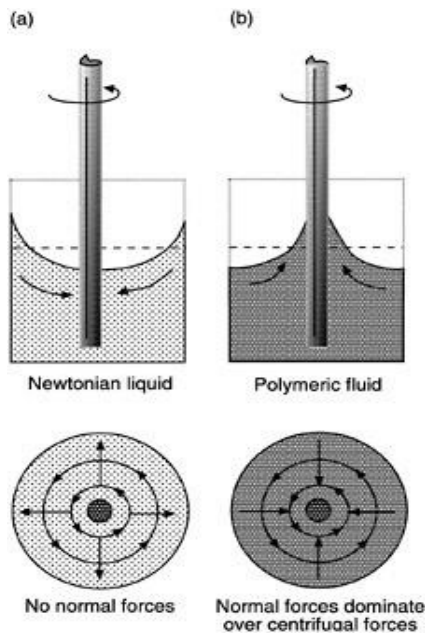


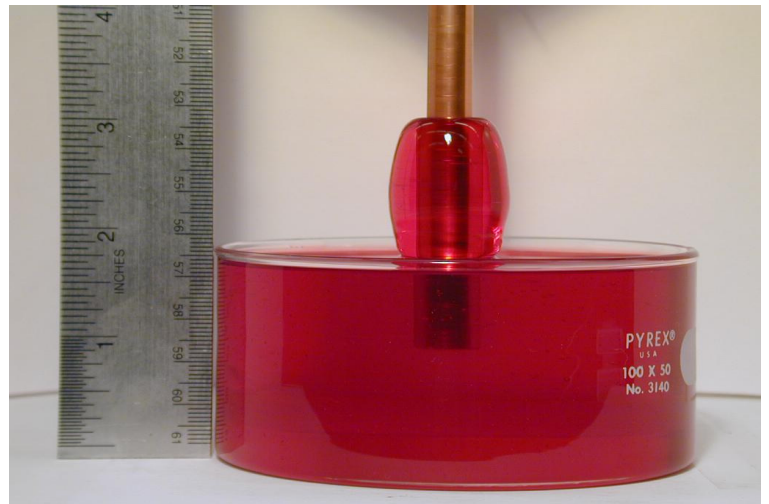
Figura 2.2: Representação do efeito de inchamento do extrudado (*die swell*) para um fluido newtoniano (N) e um fluido polimérico (P). Fonte: [8].

Outro efeito decorrente da viscoelasticidade é a presença de diferenças de tensões normais em escoamentos por cisalhamento. Em adição às tensões de cisalhamento, estes fluidos apresentam tensões extras ao longo das linhas de corrente, que derivam do estiramento e alinhamento das cadeias poliméricas ao longo destas linhas. O experimento clássico “*rod climbing*” permite visualizar este comportamento e consiste em submeter um fluido em um recipiente a uma agitação por meio de um eixo rotatório imerso no fluido. No recipiente contendo fluido newtoniano se formará uma depressão junto ao eixo do agitador. Já para um fluido polimérico, o resultado é intuitivamente inesperado: o fluido sobe junto ao eixo do agitador. Nesse experimento as linhas de corrente são círculos fechados e a tensão extra ao longo destas linhas de corrente estrangulam o fluido e forçam-no para dentro em oposição a força centrífuga e para cima em oposição à força gravitacional [8]. Na figura (2.3) podemos visualizar o experimento.

¹A notação D_e para este diâmetro é usado somente nesta figura. Nesta tese será ainda usado a notação D_e para o número de Deborah, porém não há perigo confusão.



(a) Representação das forças



(b) Fluido Polimérico

Figura 2.3: Experimento “*rod climbing*”. Na figura (b) tem-se o comportamento de um fluido polimérico sendo “puxado” para cima. Em (a) tem-se a representação das forças que agem no movimento. Fonte: [33],[54].

Além da viscoelasticidade, outra característica reológica dos fluidos poliméricos, e talvez a mais conhecida, é a de possuir uma viscosidade dependente da taxa de deformação aplicada sobre o material, também conhecida como viscosidade não-newtoniana. Baseado no comportamento da dependência da viscosidade com a taxa de deformação, os fluidos poliméricos na sua grande maioria são classificados como fluidos pseudoplásticos (no inglês “*shear-thinning*”), nos quais a viscosidade diminui com a taxa de deformação [8],[4],[23]. Experimentalmente, a viscosidade aparente é a propriedade material mais bem conhecida e na maioria dos líquidos poliméricos a curva $\eta \times \dot{\gamma}$ apresenta duas regiões. A primeira região, a baixas taxas de cisalhamento, chamada platô newtoniano observa-se que os valores da viscosidade independem da taxa de cisalhamento, a segunda região se encontra a altas taxas de cisalhamento, chamada de região de lei de potências, na qual a viscosidade decresce rapidamente com as taxas de cisalhamento. Quando $\dot{\gamma}$ tende a zero obtém-se $\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0$, chamada de viscosidade do platô newtoniano. A altas taxas de cisalhamento a viscosidade pode voltar a ser independente de $\dot{\gamma}$ e nesse caso ela se aproxima de um valor constante que denota-se por η_∞ . Um exemplo deste tipo de gráfico poderá ser visto na seção (3.3.1).

2.1 Movimento Browniano

Nas equações fundamentais que serão utilizadas neste trabalho, que podem ser vistas no capítulo (4), tem-se a aplicação da hipótese do equilíbrio entre as forças restauradoras devido ao movimento Browniano e as forças elásticas. Diante disso esta seção traz uma pequena apresentação deste movimento.

O movimento Browniano pode ser definido como sendo o movimento aleatório de partículas microscópicas (nano ou micrométricas) imersas em um fluido. Este movimento (sem memória) provém dos choques das moléculas do fluido nessas partículas microscópicas. A descoberta deste movimento é atribuída ao botânico escocês Robert Brown [11]. Brown estava estudando o movimento de partículas existentes dentro do polén através de um microscópio (vale notar que ele foi um dos primeiros cientistas a utilizar o microscópio em suas pesquisas). Ele observou que estas pequenas partículas executavam um movimento agitado e irregular, e mostrou que tal movimento não poderia ser atribuído a sistemas vivos, mas sim a partículas inanimadas sofrendo choques de outras partículas ainda maiores (moléculas que compõem o fluido) em que estas estão imersas.

Os experimentos de Brown deram início a uma série de outros experimentos realizados também em meados do século XIX. Desta forma ficou evidente que o movimento Browniano era dependente de diversos parâmetros físicos. Podemos citar que: a agitação das moléculas aumentava na medida em que se diminuía o diâmetro e a densidade das partículas suspensas (geralmente $10^{-6} m$) ou então na medida em que se aumentava a temperatura ou se diminuía a viscosidade do fluido. Embora Brown pudesse evidenciar a existência deste movimento, ele não foi capaz de descrevê-lo matematicamente. Alguns cientistas tentaram descrevê-lo mas sem êxito até que em 1905 Albert Einstein, em um de seus trabalhos [24], desenvolveu uma teoria quantitativa para esse fenômeno e demonstrava a existência de átomos. Mostrou ainda que medidas precisas deste movimento poderiam revelar o tamanho das moléculas.

Em 1908, Langevin [42] desenvolveu uma teoria mais direta para o estudo do movimento Browniano, esta teoria se baseia no estudo da trajetória de uma partícula. Abaixo mostramos a equação obtida por Langevin para o caso unidimensional,

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -6\pi\mu a \frac{dx}{dt} + f, \quad (2.5)$$

em que m é a massa da partícula esférica de raio a localizada na posição x no fluido de viscosidade μ . O termo f é uma força aleatória produzida pelas flutuações das moléculas.

A equação diferencial de segunda ordem dada pela equação (2.5) trata-se de uma equação estocástica na qual a média temporal de f é nula e escreve-se $\langle f(t) \rangle = 0$. Entende-se por resolver esta EDO como encontrar a probabilidade de que a solução seja $u = dx/dt$ no tempo t dado que $u = u_0$ e $x(0) = x_0$ em $t = 0$.

Multiplicando a equação (2.5) por x , tem-se:

$$mx \frac{d^2x}{dt^2} = -6x\pi\mu a \frac{dx}{dt} + xf, \quad (2.6)$$

e usando as identidades

$$x \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d(x^2)}{dt}, \quad (2.7)$$

e

$$x \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{2} \frac{d^2(x^2)}{dt^2} - \left(\frac{dx}{dt} \right)^2, \quad (2.8)$$

pode-se reescrever a equação (2.5) da forma

$$\frac{m}{2} \frac{d^2(x^2)}{dt^2} - m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = -3\pi\mu a \frac{d(x^2)}{dt} + xf. \quad (2.9)$$

Considerando-se a média da equação (2.9) para um tempo suficientemente grande, tem-se:

$$m \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + 6\pi\mu a \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = 2m \left\langle \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right\rangle, \quad (2.10)$$

em que $\langle x^2 \rangle$ denota o deslocamento médio quadrático da partícula. Note que o termo do lado direito da equação (2.10) representa a energia cinética das partículas que por sua vez está relacionada à energia térmica do fluido do seguinte modo:

$$m \left\langle \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right\rangle = K_B T, \quad (2.11)$$

em que K_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta do fluido. Ao substituir esta última equação na equação (2.10) e resolvendo a EDO obtém-se:

$$\langle x^2 \rangle = 2 \left(\frac{K_B T}{6\pi\mu a} \right) t = 2Dt, \quad (2.12)$$

e defini-se $D = K_B T / 6\pi\mu a$ como sendo o coeficiente de difusão Browniano de Stokes-Einstein. Percebe-se que o deslocamento médio de uma partícula sujeita ao movimento Browniano é proporcional a $t^{1/2}$. Diferentemente do movimento de queda livre, por exemplo, no qual o deslocamento é proporcional ao quadrado do tempo de queda.

2.2 Geração Teórica de uma suspensão e de macromoléculas.

Para gerar um conjunto de N partículas randomicamente distribuídas, numa suspensão, foi utilizado um gerador de números randômicos em fortran no intervalo real $[\varepsilon, 100 - \varepsilon]$, i.e., foram gerados N pontos $(x_i, y_i, z_i) \in \mathbb{R}^3$, de maneira que $\varepsilon < x_i < 100 - \varepsilon$, $\varepsilon < y_i < 100 - \varepsilon$, e $\varepsilon < z_i < 100 - \varepsilon$, para todo $1 \leq i \leq N$. Estes pontos representam o centro das partículas esféricas de raio ε .

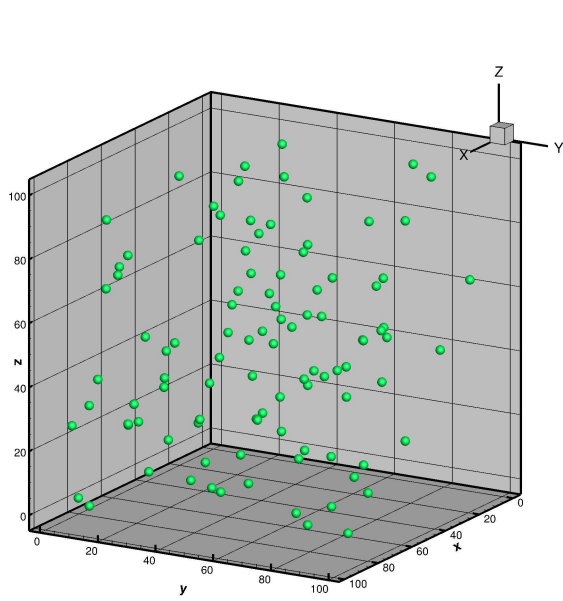
Define-se $\phi = V_p/V$, como sendo a fração volumétrica de uma suspensão polimérica em que V é o volume total da mesma. Esta suspensão é a mistura de um fluido base Newtoniano mais o volume total das partículas², V_p . Note que pode-se escrever $V_p = Nv_p$, em que $v_p = 4\pi\varepsilon^3/3$ é o volume de uma única partícula, assim

$$\phi = \frac{Nv_p}{V} = nv_p, \quad (2.13)$$

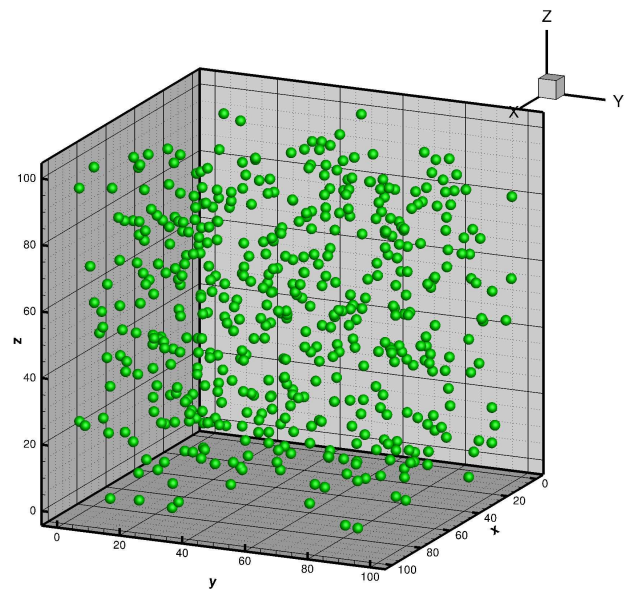
e aqui $n = N/V$ é definido como sendo o número de densidade de partículas.

Na figura (2.4) as partículas de raio $\varepsilon = 1$ foram inseridas dentro de uma caixa cúbica de aresta $X = 100\varepsilon$. E, para garantir que não há sobreposição de partículas assumi-se que a distância entre os centros das esferas (partículas) seja sempre maior ou igual a $(2\varepsilon + \alpha)$, em que $\alpha = 10^{-4}$. Este α é para garantir a existência de uma fina camada do fluido base entre as partículas esféricas. Veja na figura (2.4) como fica a configuração de uma suspensão polimérica para diferentes concentrações ϕ . Não seria demais pedir ao leitor que tentasse imaginar estas partículas (esferas) como sendo as macromoléculas do fluido quando no estado de equilíbrio, i.e., as macromoléculas enoveladas neste estado (“*boudend esferas*”).

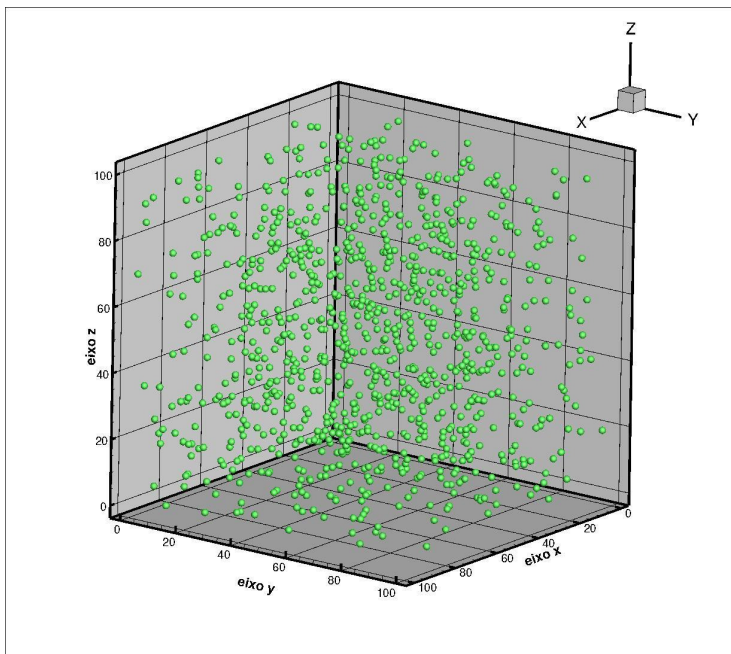
²Podendo ser macromoléculas.



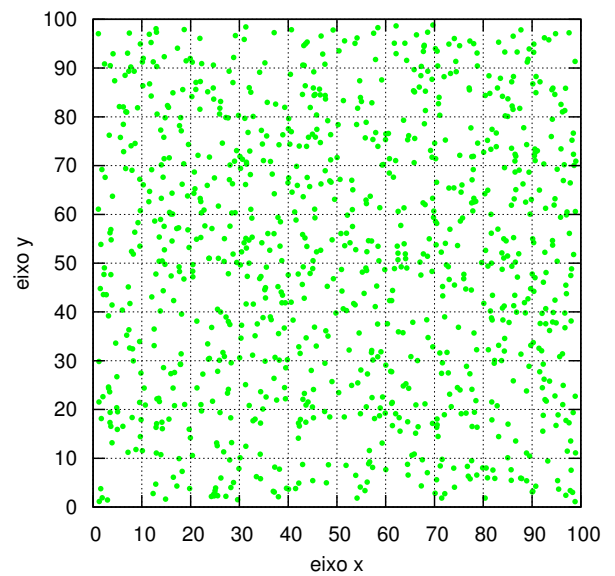
(a) Suspensão com $\phi = 400 \text{ ppm}$



(b) Suspensão com $\phi = 2000 \text{ ppm}$



(c) Suspensão com $\phi = 4000 \text{ ppm}$



(d) Projeção no plano xy da figura (c).

Figura 2.4: Solução com diferentes frações volumétricas.

Suspensões diluídas de polímeros, sem sobreposição das macromoléculas, tem o comportamento que pode ser idealizado como sendo uma cadeia de polímeros composto por duas “esferas”, que representam a força de arrasto, ligada a uma mola de Hook, que representa a força elástica. Esta configuração de esfera-mola é chamado haltere. Neste modelo uma macromolécula é composta de N segmentos rígidos (cada uma correspondente a um monômero individual) de comprimento δ , com cada monômero individual orientado aleatoriamente em relação aos segmentos adjacentes [2].

A configuração de distribuição de equilíbrio da macromolécula é então dada por um loop aleatório de N passos de comprimento δ . Neste modelo, no estado de equilíbrio da suspensão, o movimento browniano randomiza a configuração da macromolécula, fazendo com que cada configuração seja igualmente provável. Assim do teorema do limite central [26], a média da distância de equilíbrio a da macromolécula será tal que:

$$a \approx \sqrt{N}\delta, \quad (2.14)$$

reforçando que a é a média do comprimento de ponta-a-ponta da macromolécula no seu estado de equilíbrio randômico e $\ell \approx N\delta$ é o comprimento da macromolécula quando totalmente estirada nestas considerações [35],[36].

Para as figuras (2.5),(2.6) e (2.7) abaixo se têm os N números aleatórios no intervalo $[-1, 1]$, isto é, se assume neste caso que $|x_i| \leq 1$, $|y_i| \leq 1$ e $|z_i| \leq 1$ para todo $1 \leq i \leq N$.

A figura (2.5) foi criada (sempre para um $\delta = 1\mu m$, fixo)³ a partir de uma média de 10 amostras de a geradas randomicamente para cada N pertencente ao conjunto $A = \{100, 225, 400, 625, 900, 1000\}$, isto é, por exemplo para $N = 100$, foram obtidas 10 amostras de a e em seguida calcula-se a média \bar{a} e o desvio padrão da amostra. Perceba neste caso que a medida que N aumenta no conjunto A melhor se verifica a relação $a \approx \sqrt{N}\delta$.

³Valor aleatoriamente escolhido.

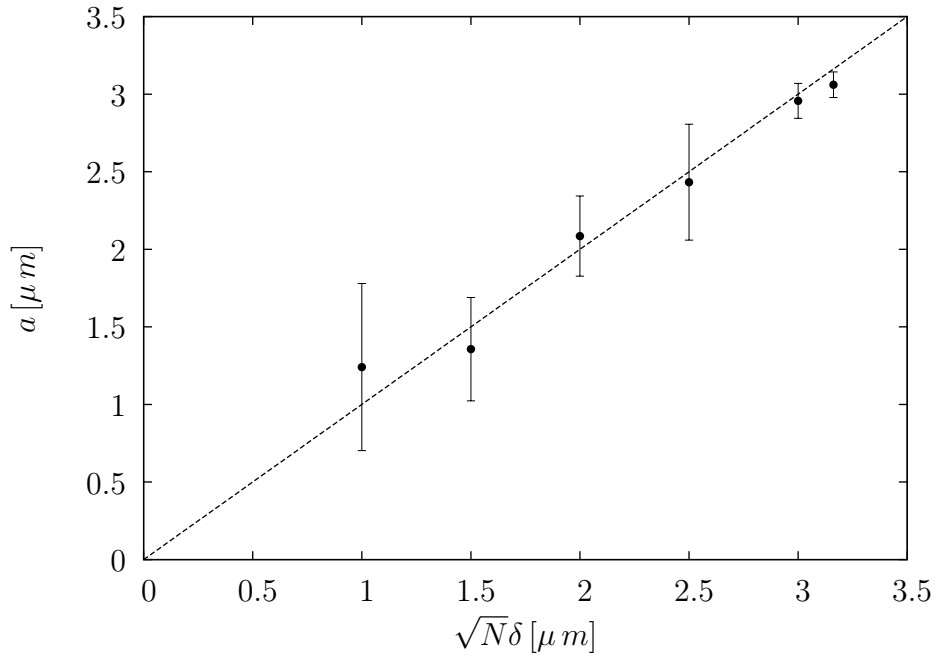


Figura 2.5: Distribuição do valor de a em relação ao valor de $\sqrt{N}\delta$, a medida que N aumenta no conjunto A . Foi usado $\delta = 1\mu m$ fixo. A linha pontilhada representa a função identidade.

A figura (2.6) apresenta o gráfico que mostra o comportamento da média e da variância em função do número de partículas geradas randomicamente. Nossa análise numérica, para o nosso gerador de números randômicos, mostrou que para 1000 partículas a variância calculada foi igual a 0,995 e a média foi 0,042. Num modelo ideal o natural seria esperar que para um número suficientemente grande de partículas nossa variância seja igual a um e a média seja igual a zero, pois os N números aleatórios gerados estão entre $[-1, 1]$.

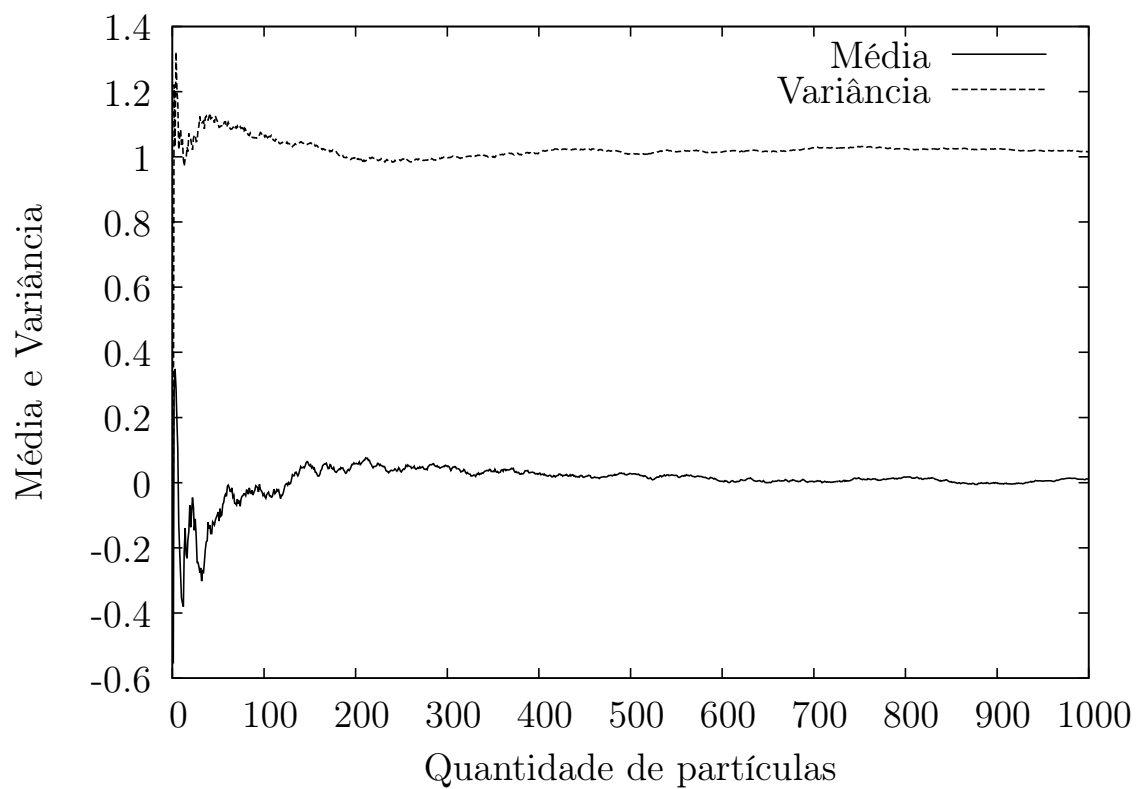
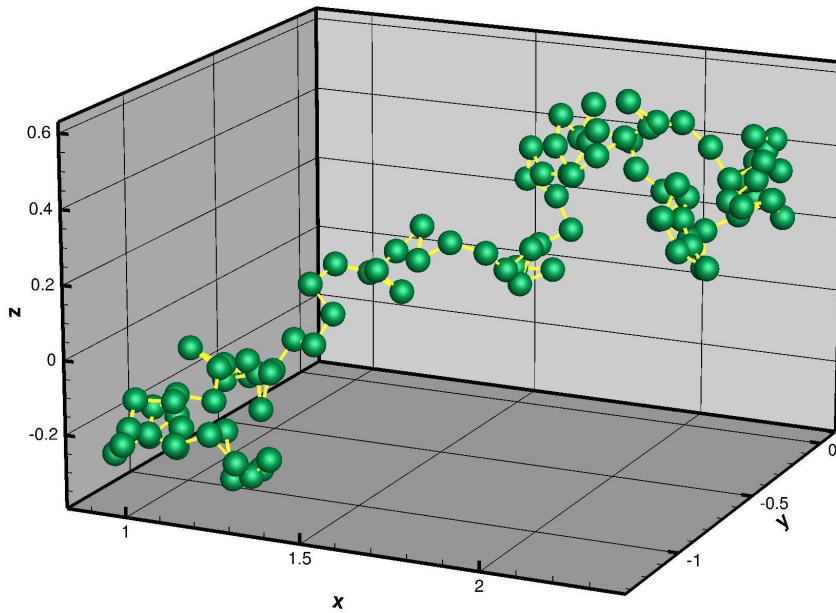
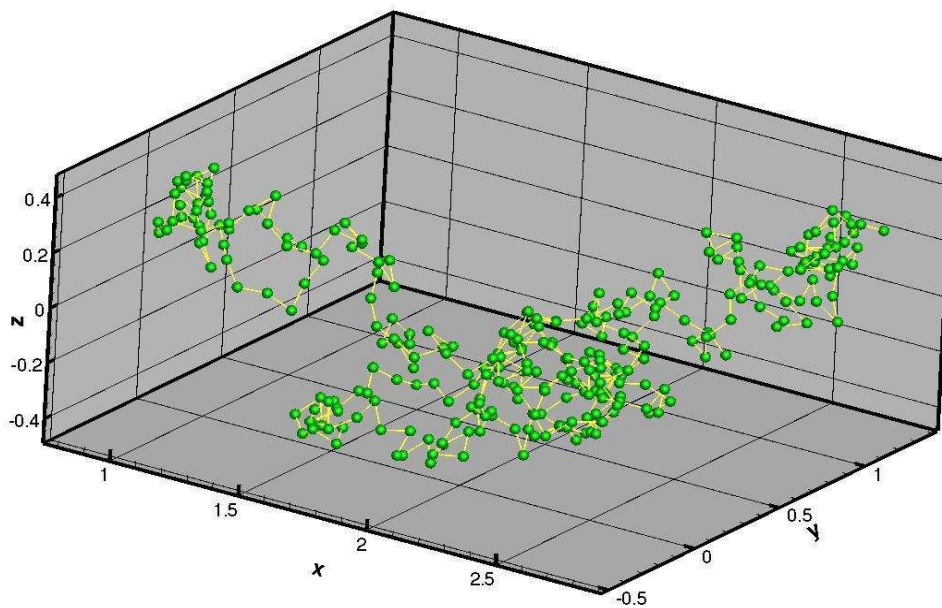


Figura 2.6: Média e variância dos N números aleatórios gerados randomicamente no intervalo $[-1, 1]$. Acima tem-se a variância convergindo para um e abaixo tem-se a média convergindo para zero.

Na figura (2.7) a seguir se vê a representação de duas macromoléculas geradas numericamente. É um exercício quase impossível indicar o local exato no qual começa e/ou termina a macromolécula.



(a) $N = 100$



(b) $N = 300$

Figura 2.7: Representação de duas macromoléculas em seu estado de equilíbrio randômico. Em (a) temos 100 esferas e em (b) 300.

2.3 Descrição Fenomelógica das Equações Constitutivas ou Materiais

Antes de se explicitar os modelos de equações constitutivas para materiais simples, enumera-se abaixo [60],[21] os princípios físicos aos quais estas equações devem satisfazer a fim de que sejam mais próximas da realidade. O tensor de tensões Σ que descreve a dinâmica do material será composto pela parte $-p\mathbf{I}$ (referente ao estado de repouso do material ou do corpo contínuo) mais a parte deviatórica σ (que representa o movimento). Assim escreve-se:

$$\Sigma = -p\mathbf{I} + \sigma, \quad (2.15)$$

p é a pressão mecânica e $\mathbf{I} = \delta_{ij}$ é o tensor identidade. Enumera-se tais condições nos seis itens que se seguem:

1. $\sigma(t) = \mathcal{F}(C_0, \mathbf{U}_{t_0}(t))_{t_0 \leq t}$, isto é, o tensor σ deverá ser um funcional \mathcal{F} , ou depender, do estado de configuração inicial C_0 do fluido e do tensor simétrico positivo definido \mathbf{U}_{t_0} (ver apêndice (I)) relacionado à deformação. Esta condição também é chamada de princípio da Causalidade (relação causa-efeito) ou determinismo (memória ou história de deformação e condição inicial) em que σ depende da história do movimento (campo de velocidade ou deformação). Uma equação constitutiva mais geral relaciona a tensão no material no tempo t com o tempo $t_0 \leq t$ e experiências passadas de deformação sofrida pelo material,

$$\sigma(t) = \mathcal{F}(C_0, \mathbf{U}_{t_0}(t))_{t_0 \leq t}. \quad (2.16)$$

2. Princípio da ação local (local action) postula que somente as partículas vizinhas (pequenas vizinhanças) deverão ser envolvidas para a determinação da tensão em um ponto. Este princípio é consistente com a ideia de forças de curto alcance entre partículas ou moléculas do material. Vamos considerar uma descrição lagrangiana do movimento em que o material passa de uma posição inicial \mathbf{x} em t_0 para a posição $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ no instante de tempo $t > t_0$. Neste instante t podemos escrever, usando série de Taylor,

$$\mathbf{X}(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) = \mathbf{X}(\mathbf{x}) + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} + \mathcal{O}(\|d\mathbf{x}\|^2). \quad (2.17)$$

Neste princípio assume-se que $\mathcal{O}(\|d\mathbf{x}\|^2) \ll 1$ (o qual pode ser desprezado) e tem-se também que $d\mathbf{X} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x}$. Defini-se o tensor $\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}}$ como sendo o tensor gradiente de deformação.

3. Uma equação constitutiva deve ser sempre válida independente do sistema de coordenada em que o vetor posição, velocidade ou tensor de tensões é descrito, isto é, esta ideia é definida como sendo o princípio da invariância de coordenadas. A forma funcional \mathcal{F} deve ser mantida independente se $\boldsymbol{\sigma}$ e $\nabla \mathbf{u}$ são descritos em coordenadas retangulares, esféricas, cilíndricas (ver apêndices (I) e (III)).
4. Indiferença material do referencial ou do inglês *Material Frame Indifference* (MFI) [46],[60] também chamado de princípio da objetividade (Trusdell e Tapia, 1960; Oldroyd, 1950; Trusdell e Noll, 1965), este postula que o material deve ser independente do referencial adotado. O campo instantâneo de tensões (ou resposta do material) deve independer do movimento do observador ou referencial. A resposta mecânica do material deve ser invariante com relação ao movimento de corpo rígido arbitrário ou rotação de eixos. Mais detalhes no apêndice (III).
5. O princípio “*Fading Memory*” [60] requer que a estrutura instantânea do campo de tensões esteja mais relacionadas com eventos (deformações) mais recentes. Dito de outra forma o tensor das tensões $\boldsymbol{\sigma}$ depende mais fortemente das deformações no tempo presente t do que em um instante de tempo passado $t' \ll t$.
6. E por fim, a ausência de um estado de referência. Não existe um estado natural de equilíbrio (ou preferencial) do material em contraste com o comportamento de materiais sólidos (memória perfeita).

2.3.1 Descrição geral de Equações Constitutivas de Materiais Simples

Um fluido simples, como foi definido na seção (2.3), é uma material cuja equação constitutiva possui todos os princípios do formalismo constitutivo. Esta classe de fluidos é de grande importância, pois a maioria dos fluidos complexos apresentam seus modelos constitutivos baseados no conceito de fluido simples. Outro aspecto importante é o fato de que,

para estes fluidos, o tensor das tensões $\boldsymbol{\sigma}$ é descrito como um funcional do tensor gradiente de deformação $\mathbf{F}(\hat{t})$ relativo e da história de deformação, fatos estes que são consequências diretas, respectivamente, do princípio da ação local e do princípio da causalidade. Com base nisso, tem-se que o tensor das tensões poderá ser representado formalmente da seguinte forma [21]:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \mathcal{F} \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \boldsymbol{\xi}} : 0 \leq \hat{t} \leq t \right), \quad (2.18)$$

em que \mathcal{F} é uma função. \mathbf{X} é o vetor posição no tempo t e $\boldsymbol{\xi}$ é um vetor posição num tempo arbitrário.

Para se obter a equação (2.18), nesta seção [21] é feita a caracterização do fluido em termos do tensor gradiente de deformação \mathbf{F} e é apresentado as condições necessárias para que o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ seja MFI conforme condição 4 da seção (2.3). Seja

$$\mathbf{F}(t) = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}}, \quad (2.19)$$

o referido tensor no qual \mathbf{X} é o vetor posição no tempo t e \mathbf{x} é o vetor no tempo \hat{t} . Em geral $t \neq \hat{t}$, e é claro quando $t = \hat{t}$ tem-se que $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ e deste modo nosso tensor \mathbf{F} é tal que

$$\mathbf{F}(t = \hat{t}) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{I} = \delta_{ij}. \quad (2.20)$$

Defini-se $J = \det(\mathbf{F})$ e para que se tenha de fato uma transformação bijetora $\mathbf{X}(\mathbf{x}, \hat{t})$ ou $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ é necessário e suficiente que $J \neq 0$. Diante destas hipóteses e pelo final do apêndice (I) pode-se decompor o tensor \mathbf{F} de forma única e de duas maneiras possíveis (decomposição polar)

$$\begin{cases} \mathbf{F}_t(\hat{t}) = \mathbf{Q}_t(\hat{t})\mathbf{U}_t(\hat{t}) & (a \text{ direita}), \\ \mathbf{F}_t(\hat{t}) = \mathbf{V}_t(\hat{t})\mathbf{Q}_t(\hat{t}) & (a \text{ esquerda}), \end{cases} \quad (2.21)$$

em que os tensores $\mathbf{U}_t(\hat{t})$ e $\mathbf{V}_t(\hat{t})$ são simétricos positivo definido e valem as relações $\mathbf{U}_t^2(\hat{t}) = \mathbf{F}_t^T(\hat{t})\mathbf{F}_t(\hat{t})$ e $\mathbf{V}_t^2(\hat{t}) = \mathbf{F}_t(\hat{t})\mathbf{F}_t^T(\hat{t})$. Estes tensores estão ligados a efeito de deformação enquanto que o tensor ortogonal $\mathbf{Q}(t)$ está associado à rotação.

Para se escrever a equação constitutiva dada em (2.18) inicia-se usando a regra da cadeia, de maneira que pode-se:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \mathbf{F}_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}}. \quad (2.22)$$

Assim $\boldsymbol{\sigma}(t) = \mathcal{F} \left(\mathbf{F}_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} : 0 \leq \hat{t} \leq t \right)$. Para análise da objetividade do tensor \mathbf{F} , propõe-se uma mudança de coordenada do sistema $\{x\}$ para o sistema $\{x'\}$ e define-se as

representações do tensor σ no sistema de coordenada $\{x\}$ no tempo \hat{t} e $\{x'\}$ no tempo t' , por:⁴

$$\begin{cases} F_{ij}(\hat{t}) = \frac{\partial X_i}{\partial x_j}(\hat{t}) \\ F'_{ij}(t') = \frac{\partial X'_i}{\partial x'_j}(t'), \end{cases} \quad (2.23)$$

em que $t' = t - \varrho$, $\varrho > 0$. Agora usando a transformação homogênea [60]:

$$\begin{cases} x'_i(t) = Q_{ij}(t)x_j(t) + b_i(t); \\ X'_i(t') = Q_{ij}(t')X_j(t') + b_i(t'); \end{cases} \quad (2.24)$$

e usando novamente a regra da cadeia, obtém-se:

$$F'_{ij}(t') = \frac{\partial X'_i}{\partial x'_j} = \frac{\partial X'_i}{\partial X_m} \frac{\partial X_m}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial x'_j}(t). \quad (2.25)$$

Mas $\frac{\partial X'_i}{\partial X_m} = Q_{ip} \frac{\partial X_p}{\partial X_m} = Q_{ip} \delta_{pm} = Q_{im}(t')$ e analogamente tem-se que $\frac{\partial x_k}{\partial x'_j} = Q_{jk}(t)$. Assim a equação (2.25) ficará:

$$\mathbf{F}'_t(t') = \mathbf{Q}(t') \mathbf{F}(t') \mathbf{Q}^T(t). \quad (2.26)$$

Perceba que a equação (2.26) não obedece ao princípio da objetividade, visto que ao final da última equação o tensor \mathbf{Q}^T não está avaliado em t' . Porém, de qualquer maneira, pode-se escrever a partir da equação (2.26), a equação que se segue:

$$\mathbf{F}'_t(\hat{t}) = \mathbf{Q}(\hat{t}) \mathbf{F}_t(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(t). \quad (2.27)$$

Tem-se ainda $\frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \xi'} = \mathbf{Q}(t) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} \mathbf{Q}^T(0)$ e assumindo (por hipótese) que $\mathbf{Q}^T(0) = \mathbf{I}$, pois se quer um estado inicial de referência fixo. Portanto pode-se considerar:

$$\sigma'(t) = \mathcal{F}\left(\mathbf{F}'_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \xi'} : 0 \leq \hat{t} \leq t\right), \quad (2.28)$$

em que

$$\mathbf{F}'_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \xi'} = [\mathbf{Q}(\hat{t}) \mathbf{F}_t(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(\hat{t})] \mathbf{Q}(t) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} \mathbf{I}. \quad (2.29)$$

Utilizando a decomposição polar à direita, onde $\mathbf{R}_t^T(\hat{t}) = \mathbf{Q}(\hat{t})$, tem-se que $\mathbf{F}_t(\hat{t}) = \mathbf{R}_t(\hat{t}) \mathbf{U}_t(\hat{t})$ e a equação (2.29) ficará

$$\mathbf{F}'_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \xi'} = \mathbf{R}_t^T(\hat{t}) \mathbf{R}_t(\hat{t}) \mathbf{U}_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi}, \quad (2.30)$$

⁴Note que daqui em diante usa-se a notação indicial.

ou simplesmente

$$\mathbf{F}'_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \boldsymbol{\xi}'} = \mathbf{U}_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}}. \quad (2.31)$$

Assim $\boldsymbol{\sigma}'(t) = \mathcal{F}\left(\mathbf{U}_t(\hat{t}) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} : 0 \leq \hat{t} \leq t\right)$. Lembre-se que para fluidos simples não existe um estado de referência, assim o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ deverá ser da forma:

$$\boldsymbol{\sigma}'(t) = \mathcal{F}\left(\mathbf{U}_t(\hat{t}) : -\infty < \hat{t} \leq t\right). \quad (2.32)$$

Note, finalmente, que pode-se escrever:

$$\mathbf{Q}(\hat{t}) \mathbf{F}_t(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(t) = [\mathbf{Q}(\hat{t}) \mathbf{R}_t(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(t)] [\mathbf{Q}(\hat{t}) \mathbf{U}_t(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(t)], \quad (2.33)$$

no qual o primeiro termo entre colchetes do lado direito da equação (2.33) não é MFI, porém o segundo termo entre colchetes é MFI. Da equação (2.32) tem-se que

$$\mathbf{Q} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Q}^T(t) = \mathbf{Q}(t) \mathcal{F}(\mathbf{U}_t(\hat{t})) \mathbf{Q}^T(t), \quad (2.34)$$

mas também é verdade que $\boldsymbol{\sigma}' = \mathcal{F}(\mathbf{U}'_t(\hat{t}))$ e $\boldsymbol{\sigma}'(t) = \mathcal{F}(\mathbf{Q}(t) \mathbf{U}_t(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(\hat{t}))$ e comparando isto com a equação (2.32) deve-se ter

$$\boldsymbol{\sigma}'(t) = \mathcal{F}(\mathbf{Q}(t) \mathbf{U}_t(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(t) : -\infty < \hat{t} \leq t). \quad (2.35)$$

2.4 Tensores de Cauchy-Green e Rivlin-Erickson

Deste ponto até a seção (2.4.2) se verá como a partir de modelos lineares podem surgir modelos não-lineares para o tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ [9],[8],[41]. Como definido na seção (2.3.1) considere uma descrição lagrangeana do movimento, em que duas partículas do fluido, inicialmente no tempo \hat{t} estão separadas a uma distância $d\mathbf{X}$ uma da outra. Suponha ainda a ausência de deformação. Imagine que para um tempo $t > \hat{t}$, devido ao escoamento, as partículas passem a estar a uma distância $d\mathbf{x}$ uma da outra. Este movimento relativo pode ser descrito em termos do inverso do tensor gradiente de deformação (equação (2.19)) da seguinte forma, usando série de Taylor,

$$\mathbf{x}(\mathbf{X} + d\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} d\mathbf{X} + \mathcal{O}(\|d\mathbf{X}\|^2). \quad (2.36)$$

Suponha que $\|d\mathbf{X}\| \ll 1$ e portanto pode-se então desprezar o termo de segunda ordem na equação (2.36) e, pela equação (2.19), tem-se que $d\mathbf{X} = \mathbf{F} d\mathbf{x}$. Aqui irá se propor a

decomposição polar à esquerda do tensor taxa de deformação \mathbf{F} (conforme apêndice (I)) e assim

$$\mathbf{F} = \mathbf{Q}(\hat{t}) \cdot \mathbf{U}(\hat{t}), \quad (2.37)$$

em que o tensor ortogonal \mathbf{Q} está associado a rotação de corpo rígido e o tensor \mathbf{U} está associado ao efeito de estiramento do arco infinitesimal $d\mathbf{X}$.

Da equação (2.37) obtém-se que $\mathbf{F}^T = \mathbf{U}^T \mathbf{Q}^T = \mathbf{U} \mathbf{Q}^T$ e ao se multiplicar a direita por \mathbf{F} nesta última expressão, tem-se $\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{U}^2$. Deste modo defini-se o tensor deformação direito de Cauchy-Green [8], como sendo

$$\mathbf{C}(\hat{t}) = \mathbf{U}^2 = \mathbf{F}^T \mathbf{F}. \quad (2.38)$$

Para obter uma expressão para a deformação do vetor $d\mathbf{X}$ procede-se da seguinte forma. Pela equação (2.19), tem-se:

$$\|d\mathbf{X}\|^2 = d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} = \mathbf{F} d\mathbf{x} \cdot \mathbf{F} d\mathbf{x} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = \mathbf{C} d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}, \quad (2.39)$$

ou ainda, usando a multiplicação usual entre matriz e vetor, chega-se a equação:

$$\|d\mathbf{X}\| = \sqrt{d\mathbf{x}^T \mathbf{C} d\mathbf{x}}. \quad (2.40)$$

Supondo, agora, que as trajetórias do movimento são conhecidas e que a história de deformação também é conhecida, isto é, $\mathbf{C}(\hat{t})$ é conhecido para todo $t \geq \hat{t}$. E escrevendo a equação (2.38) em notação indicial tem-se,

$$C_{ij}(\hat{t}) = \sum_{k=1}^3 F_{ki}(\hat{t}) F_{kj}(\hat{t}) = F_{ki}(\hat{t}) F_{kj}(\hat{t}) = \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_j}. \quad (2.41)$$

Lembre-se que \mathbf{X} é função de \hat{t} neste tempo de referência e que \mathbf{x} não é, ao calcular a derivada da equação (2.41) com relação a \hat{t} , obtém-se:

$$\frac{dC_{ij}(\hat{t})}{d\hat{t}} = \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_j} + \frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_j}. \quad (2.42)$$

Note que ao avaliar a equação (2.42) no tempo $t = \hat{t}$ temos é claro $X_k = x_k$, e assim

$$\frac{dC_{ij}(t = \hat{t})}{d\hat{t}} = \frac{\partial u_i(t = \hat{t})}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(t = \hat{t})}{\partial x_i} = 2D_{ij}. \quad (2.43)$$

Assim ao derivar a equação (2.38) em relação ao tempo \hat{t} , obteve-se o tensor $2\mathbf{D}$. Deste modo se define o tensor

$$\frac{d\mathbf{C}(t = \hat{t})}{dt} = \mathbf{A}^{(1)} = 2\mathbf{D}, \quad (2.44)$$

como sendo o primeiro tensor de Rivlin-Erickson [8]. Pode-se ainda diferenciar a equação (2.42) com relação a \hat{t} , isto é,

$$\frac{d^2 C_{ij}(\hat{t})}{d\hat{t}^2} = \frac{d}{d\hat{t}} \left(\frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_j} \right) + \frac{d}{d\hat{t}} \left(\frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_j} \right). \quad (2.45)$$

Após os devidos cálculos na equação (2.45), obtém-se a expressão:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 C_{ij}(\hat{t})}{d\hat{t}^2} &= \frac{2\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_j} + \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial X_n(\hat{t})}{\partial x_j} \frac{d}{d\hat{t}} \left(\frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial X_n} \right) + \\ &+ \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial X_n} \frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_j} + \frac{\partial X_n(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{d}{d\hat{t}} \left(\frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial X_n} \right) \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_j} + \frac{\partial X_k(\hat{t})}{\partial x_j} \frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial X_n} \frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Fazendo novamente $t = \hat{t}$ na equação (2.46), obtém-se:

$$\frac{d^2 C_{ij}(\hat{t})}{d\hat{t}^2} = \frac{2\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_i} \frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial x_j} + \frac{d}{d\hat{t}} \left(\frac{\partial u_k(\hat{t})}{\partial X_n} \right) + \frac{\partial u_i(\hat{t})}{\partial x_n} \frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_j} + \frac{d}{d\hat{t}} \left(\frac{\partial u_j(\hat{t})}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial u_j(\hat{t})}{\partial x_n} \frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_i}. \quad (2.47)$$

Como o tensor $\mathbf{A}^{(1)} = 2\mathbf{D}$ é simétrico, ao usá-lo na equação (2.47), chega-se a equação,

$$\frac{d^2 C_{ij}(\hat{t})}{d\hat{t}^2} = \frac{d}{d\hat{t}} \left(A_{ij}^{(1)} \right) + \frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_j} A_{in}^{(1)} + \frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_i} A_{jn}^{(1)}. \quad (2.48)$$

Defini-se o segundo tensor de Rivlin-Erickson como sendo

$$\frac{d^2 C_{ij}(\hat{t})}{d\hat{t}^2} = A_{ij}^{(2)}. \quad (2.49)$$

Usando as identidades,

$$\frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_i} A_{jn}^{(1)} = \left[\nabla \mathbf{u}(\hat{t}) \cdot \mathbf{A}^{(1)} \right]_{ij} \quad \text{e} \quad \frac{\partial u_n(\hat{t})}{\partial x_j} A_{ni}^{(1)} = \left[\mathbf{A}^{(1)} \cdot (\nabla \mathbf{u}(\hat{t}))^T \right]_{ij}, \quad (2.50)$$

pode-se escrever a equação (2.48) na notação de Gibbs, da seguinte forma:

$$\mathbf{A}^{(2)} = \frac{d}{d\hat{t}} \left(\mathbf{A}_{ij}^{(1)} \right) + \nabla \mathbf{u}(\hat{t}) \cdot \mathbf{A}^{(1)} + \mathbf{A}^{(1)} \cdot (\nabla \mathbf{u}(\hat{t}))^T. \quad (2.51)$$

A derivada temporal do tensor $\mathbf{A}^{(1)}$ (quando $\hat{t} \rightarrow t$) com relação a \hat{t} deve ser entendida como a derivada material, $D/D\hat{t}$, uma vez que estamos seguindo a partícula. Pode-se ainda continuar o processo de derivação com respeito a \hat{t} , do tensor de Cauchy-Green e obter uma expressão geral para os tensores de Rivlin-Erickson [52] da forma $\mathbf{A}^{(n+1)}$. Pode ser mostrado após cálculos enfadonhos que:

$$\mathbf{A}^{(n+1)} = \frac{D\mathbf{A}^{(n)}}{D\hat{t}} + \mathbf{L}^T \cdot \mathbf{A}^{(n)} + \mathbf{A}^{(n)} \cdot \mathbf{L}, \quad (2.52)$$

em que $\mathbf{L} = [\nabla \mathbf{u}(\hat{t})]^T$. Mostra-se, também, que os tensores de Rivlin-Erickson são quantidades objetivas conforme definição dada no apêndice (I).

2.4.1 Expansão de Rivlin-Erickson

Na equação (2.53) abaixo se vê a expansão, em série de Taylor, do tensor de Cauchy-Green. Aqui, como acima, se faz a hipótese de um escoamento lento (ou fraco), que não causa deformações consideráveis no fluido.

$$C_{ij}(t') = C_{ij}(t) - \frac{dC_{ij}}{dt'} \Big|_{t'=t} (t-t') + \frac{1}{2!} \frac{d^2 C_{ij}}{dt'^2} \Big|_{t'=t} (t-t')^2 + \dots, \quad (2.53)$$

em que $t = s + t'$ e $s \geq 0$. Nota-se que $C_{ij}(t) = \delta_{ij} = \mathbf{I}$ é o tensor identidade. Dessa maneira a equação (2.53) pode-se ser reescrita como sendo:

$$C_{ij}(t-t') = \delta_{ij} - A_{ij}^{(1)} s + \frac{1}{2!} A_{ij}^{(2)} s^2 + \dots = \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\frac{(-1)^n}{n!} A_{ij}^{(n)} s^n \right), \quad (2.54)$$

e defini-se $A_{ij}^{(0)} = \delta_{ij}$.

Da seção (2.3.1), pode-se considerar o tensor de tensão $\boldsymbol{\sigma}'$ em função de $\mathbf{U}^2(t')$ e assim $\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{x}, t) = \mathcal{F}\{\mathbf{U}^2(t'); s \geq 0\}$. Ao usar $\mathbf{U}^2(t-s) = \mathbf{C}(t-s)$ então pode-se escrever:

$$\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{x}, t) = \mathcal{F} \left\{ \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\frac{(-1)^n}{n!} A_{ij}^{(n)} s^n \right); s \geq 0 \right\}. \quad (2.55)$$

É razoável supor que o funcional \mathcal{F} é monotônico, isto é, não possui variações abruptas sob hipótese de um escoamento fraco. Assim, o tensor $\boldsymbol{\sigma}'$ pode ser considerado apenas como sendo uma combinação linear dos n primeiros tensores de Rivlin-Erickson, e escreve-se:

$$\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{x}, t) = \mathcal{F}(\mathbf{I}, \mathbf{A}^{(1)}, \dots, \mathbf{A}^{(n)}) = \sum_{j=0}^n \varphi_j \mathbf{A}^{(j)}, \quad (2.56)$$

em que os coeficientes φ_j são funções materiais do fluido em questão.

Neste ponto usa-se a hipótese de que $\mathbf{U}(\hat{t}) = \mathbf{I}$, para todo $\hat{t} \leq t$, isto é, supõe-se que o material está em repouso. Assim da equação (2.35) tem-se que $\boldsymbol{\sigma}(t) = \mathcal{F}\{\mathbf{I}\} = \mathbf{S}$. Agora, olhando a invariância material, note que

$$\mathbf{S}' = \boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{Q}(t) \mathbf{S} \mathbf{Q}^T(t) = \mathcal{F}\{\mathbf{Q}(t) \mathbf{U}(\hat{t}) \mathbf{Q}^T(t)\} = \mathcal{F}\{\mathbf{I}\} = \mathbf{S}. \quad (2.57)$$

Assim, \mathbf{S} é um tensor isotrópico de segunda ordem, e neste caso sabe-se que ele pode ser escrito [8] na forma:

$$\mathbf{S} = \alpha \mathbf{I}, \quad (2.58)$$

sendo α uma constante material. Tem-se por definição que o tensor de tensões geral é dado por $\boldsymbol{\Sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}$ e que pela definição da pressão mecânica deve-se ter que $tr(\boldsymbol{\sigma}) = 0$. Mas $\boldsymbol{\sigma} = \alpha\mathbf{I}$ então $tr(\boldsymbol{\sigma}) = 3\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0$. E finalmente tem-se que $\mathbf{S} = \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$, na hipótese de ser $\mathbf{U}(\hat{t}) = \mathbf{I}$.

Ainda na hipótese de ser o funcional \mathcal{F} monotônico, pode-se propor que o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ seja dado por uma soma dos tensores de Rivlin-Erickson, conforme equação (2.56) e como se viu logo acima, se $n = 0$ na referida equação então $\mathbf{S}(\mathbf{I}) = \mathbf{0}$, e daí $\boldsymbol{\sigma}$ não dependerá do tensor identidade \mathbf{I} . Agora para o caso de $n = 1$ e, pelo teorema de Cayley-Hamilton (apêndice (I)), tem-se que:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{S} = \mathcal{F}\{\mathbf{A}^{(1)}\} = \varphi_1\mathbf{A}^{(1)} + \varphi_2(\mathbf{A}^{(1)})^2, \quad (2.59)$$

mas $\mathbf{A}^{(1)} = 2\mathbf{D}$ e na hipótese de ser $\varphi_1 = \mu$ e $\varphi_2 = 0$ então obtém-se apenas

$$\boldsymbol{\Sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}, \quad (2.60)$$

que é o tensor de tensões para um fluido newtoniano incompressível.

Para $n = 2$ tem-se $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{S} = \mathcal{F}\{\mathbf{I}, \mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{A}^{(2)}\} = 2\mu\mathbf{D} + \varphi_2(\mathbf{A}^{(1)})^2 + \varphi_3\mathbf{A}^{(2)}$ e da equação (2.52) pode-se escrever:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{D} + 4\varphi_2\mathbf{D}^2 + 2\varphi_3 \left[\nabla\mathbf{u}\mathbf{D} + \mathbf{D}(\nabla\mathbf{u})^T + \frac{D(\mathbf{D})}{Dt} \right]. \quad (2.61)$$

O termo entre colchetes da equação (2.61) é a derivada oldroyd baixa do tensor \mathbf{D} , que conforme apêndice (III), pode ser escrita como

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{D} + 4\varphi_2\mathbf{D}^2 + 2\varphi_3 \frac{\delta_+(\mathbf{D})}{\delta t}. \quad (2.62)$$

É comum considerar $2\varphi_3 = -\alpha$ e $4\varphi_2 = 2\beta$ e deste modo obtém-se:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{D} + 2\beta\mathbf{D}^2 - \alpha \frac{\delta_+(\mathbf{D})}{\delta t}, \quad (2.63)$$

que é a equação constitutiva para o regime de viscoelasticidade não-linear para o tensor $\boldsymbol{\sigma}$.

Para o fluido de segunda ordem mais usado na descrição de fluidos viscoelásticos em regime linear, usa-se a hipótese $\frac{\delta_+(\mathbf{D})}{\delta t} \approx \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t}$, e desta maneira:

$$\boldsymbol{\sigma} = \underbrace{2\mu\mathbf{D} - \alpha \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t}}_{\text{viscoelasticidade linear}} + 2\beta\mathbf{D}^2, \quad (2.64)$$

note que α e β possuem unidade de $Pa s^2$.

A título de ilustração apresenta-se um exemplo para se ver um pouco da teoria que foi apresentada nas seções anteriores.

Exemplo 2.1 *Considere o caso do cisalhamento simples, que possui campo de velocidade dado por: $\mathbf{u} = (\dot{\gamma}x_2, 0, 0)$. E em $t = \hat{t}$ vamos assumir que $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) = (X_1, X_2, X_3) = \mathbf{X}$. Calculando as equações das trajetórias, obtém-se:*

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = \dot{\gamma}x_2 \Rightarrow x_1(t) = \dot{\gamma}x_2 t + c_1 \\ \frac{dx_2}{dt} = 0 \Rightarrow x_2(t) = c_2 = X_2 \\ \frac{dx_3}{dt} = 0 \Rightarrow x_3(t) = c_3 = X_3 \end{cases} \quad (2.65)$$

Agora tem-se que $x_1(t) = \dot{\gamma}x_2 t + c_1$ e, em $t = \hat{t}$, tem-se por hipótese que $x_1 = X_1$ então $c_1 = x_1 - \dot{\gamma}x_2 \hat{t}$. Assim $X_1(t) = x_1 + \dot{\gamma}x_2(t - \hat{t})$. Calculando o tensor \mathbf{F} , chega-se a matriz:

$$\mathbf{F}(t) = \begin{pmatrix} 1 & \dot{\gamma}(t - \hat{t}) & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Note que $\det(\mathbf{F}) = 1$. Assim, neste exemplo, tem-se um escoamento incompressível ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$). Note ainda que

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}\dot{\gamma} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{C}(t) = \mathbf{F}^T(t)\mathbf{F}(t) = \begin{pmatrix} 1 & \dot{\gamma}(t - \hat{t}) & 0 \\ \dot{\gamma}(t - \hat{t}) & 1 + \dot{\gamma}^2(t - \hat{t})^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.67)$$

O cálculo de $\mathbf{A}^{(1)}$ e $\mathbf{A}^{(2)}$ nos dará: $\mathbf{A}^{(1)} = 2\mathbf{D} = \dot{\gamma}(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1)$ e $\mathbf{A}^{(2)} = 2\dot{\gamma}^2\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2$. Pode-se colocar o tensor $\mathbf{C}(t)$ em função de $\mathbf{A}^{(1)}$ e $\mathbf{A}^{(2)}$, ficando do seguinte modo:

$$\mathbf{C}(t) = \mathbf{I} - \mathbf{A}^{(1)}(t - \hat{t}) + \frac{1}{2}\mathbf{A}^{(2)}(t - \hat{t})^2. \quad (2.68)$$

2.4.2 Fluidos de Reiner-Rivlin

Um fluido puramente viscoso é aquele cuja a tensão é apenas função do gradiente de velocidade instantâneo, independente da história de $\nabla\mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$, assim escreve-se [52], [8]:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \mathcal{F}(\nabla\mathbf{u})\Big|_{\hat{t}=t}, \quad (2.69)$$

aplicando o princípio da objetividade tem-se que o tensor taxa de rotação não é uma quantidade objetiva (apêndice (III)). Assim, o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ deve ser apenas função do tensor \mathbf{D} . Então, neste caso, deve-se usar

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \mathcal{F}(\mathbf{D}). \quad (2.70)$$

Todo fluido que possui seu tensor de tensões representado apenas em função de \mathbf{D} são chamados de fluidos de Reiner-Rivlin. Para um comportamento monotônico da função \mathcal{F} pode-se propor $\boldsymbol{\sigma}$ como sendo o seguinte polinômio em termos dos tensores de segunda ordem: \mathbf{I} , \mathbf{D} , \mathbf{D}^2 , \dots

$$\boldsymbol{\sigma} = f_0(I_{\mathbf{D}}, II_{\mathbf{D}}, III_{\mathbf{D}})\mathbf{I} + \sum_{n=1}^{+\infty} f_n(I_{\mathbf{D}}, II_{\mathbf{D}}, III_{\mathbf{D}})\mathbf{D}^n, \quad (2.71)$$

em que os termos $I_{\mathbf{D}}$, $II_{\mathbf{D}}$ e $III_{\mathbf{D}}$ são os invariantes principais do tensor \mathbf{D} , que são dados por

$$I_{\mathbf{D}} = \text{tr}(\mathbf{D}) = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2.72)$$

$$II_{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \left[I_{\mathbf{D}}^2 - \text{tr}(\mathbf{D}^2) \right], \quad (2.73)$$

$$III_{\mathbf{D}} = \det(\mathbf{D}). \quad (2.74)$$

Do teorema de Cayley-Hamilton (ver apêndice (I)) pode-se escrever \mathbf{D}^3 da forma

$$\mathbf{D}^3 = I_{\mathbf{D}} \mathbf{D}^2 - II_{\mathbf{D}} \mathbf{D} - III_{\mathbf{D}} \mathbf{I}, \quad (2.75)$$

isto é, dependendo apenas de \mathbf{I} , \mathbf{D} e \mathbf{D}^2 . Dessa maneira, através do teorema de Cayley-Hamilton, pode-se escrever recursivamente as potências de \mathbf{D}^n , para $n \geq 3$, na equação (2.71), apenas como função de \mathbf{I} , \mathbf{D} e \mathbf{D}^2 . Logo o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ pode ser expresso apenas como uma combinação linear de \mathbf{I} , \mathbf{D} , e \mathbf{D}^2 , como segue

$$\boldsymbol{\sigma} = g_0(I_{\mathbf{D}}, II_{\mathbf{D}}, III_{\mathbf{D}})\mathbf{I} + g_1(I_{\mathbf{D}}, II_{\mathbf{D}}, III_{\mathbf{D}})\mathbf{D} + g_2(I_{\mathbf{D}}, II_{\mathbf{D}}, III_{\mathbf{D}})\mathbf{D}^2. \quad (2.76)$$

Neste ponto vale ressaltar o importante caso particular, do fluido newtoniano. Neste caso tem-se $g_0 = -\frac{2}{3}\mu I_{\mathbf{D}}$, $g_1 = 2\mu$ e $g_2 \equiv 0$. Assim:

$$\boldsymbol{\sigma} = -\frac{2}{3}\mu \text{tr}(\mathbf{D}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D}, \quad (2.77)$$

e

$$\boldsymbol{\Sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu \left(\mathbf{D} - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right). \quad (2.78)$$

Conforme equação (2.15) e $p = p^0 - \kappa \nabla \cdot \mathbf{u}$, com κ sendo o segundo coeficiente de viscosidade. No caso de ser $\kappa = 0$ tem-se o fluido stokesiano. Para o fluido stokesiano incompressível mais geral se obtém a equação

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{D} + \beta \left(\mathbf{D}^2 - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{D}^2) \mathbf{I} \right). \quad (2.79)$$

2.5 Modelos de Fluidos Não-Newtoniano Viscosos

Nesta seção são apresentados os modelos de fluidos não-newtonianos viscosos mais comuns usados na reologia. O primeiro deles, já mencionado na introdução, é o fluido Power-law.

- **Power-Law:** relaciona a viscosidade μ do fluido e a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ do seguinte modo

$$\mu(\dot{\gamma}) = k\dot{\gamma}^{n-1}, \quad (2.80)$$

em que k e n são parâmetros a serem ajustados com os dados experimentais. Se $n = 1$ então tem-se viscosidade constante, i.e., um fluido newtoniano. Se $n < 1$, tem-se o efeito pseudo-plástico. (Exemplos: Sangue, Iogurt, chocolate líquido, maioria dos polímeros concentrados entre outros). Para $n > 1$, tem-se os fluidos dilatantes⁵, comportamento que ocorre em suspensões concentradas ou poliméricas.

Como tem-se $\dot{\gamma} = \sqrt{2\mathbf{D}:\mathbf{D}}$ então pode-se ainda escrever a viscosidade μ em termos do tensor taxa de deformação como

$$\mu(\dot{\gamma}) = k[2\mathbf{D}:\mathbf{D}]^{\frac{n-1}{2}} = k[2 \text{tr}(\mathbf{D}^2)]^{\frac{n-1}{2}}. \quad (2.81)$$

A última igualdade se deve ao fato de \mathbf{D} ser simétrico.

- **Modelo de Bingham** (ou plásticos de Bingham). Estes materiais exigem-se uma tensão mínima para poder escoar. Esta tensão mínima também é conhecida por tensão limite de escoamento ou tensão crítica⁶. Dito de outra forma, o fluido de Bingham é caracterizado por ter um comportamento de corpo rígido (sólido) quando

⁵No inglês se diz “*shear-thickening*”

⁶Em inglês “*yieldstress*”

a tensão de cisalhamento é menor que a tensão de cisalhamento crítica σ_0 . Acima da tensão crítica, o fluido começa a escoar. Exemplos destes fluidos são: Cremes dentais, graxas, pomadas e etc.

Este modelo é dado por

$$\begin{cases} \sigma = \sigma_0 + \mu\dot{\gamma}; & \sigma > \sigma_0; \\ \dot{\gamma} = 0; & \sigma < \sigma_0, \end{cases} \quad (2.82)$$

sendo σ_0 a tensão crítica.

- **Carreou-Yasuda (C-Y)** combina toda a região power-law e as duas regiões $\mu_0 = \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \mu(\dot{\gamma})$ e $\mu_\infty = \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \mu(\dot{\gamma})$. O modelo é dado por

$$\frac{\mu - \mu_\infty}{\mu_0 - \mu_\infty} = [1 + (\lambda\dot{\gamma})^a]^{\frac{n-1}{a}} \quad (2.83)$$

Os parâmetros λ e n devem ser obtidos através de ajustes de dados experimentais ou numéricos.

Neste ponto apresenta-se um limite assintótico para o modelo C-Y. Para isso assume-se que $\lambda \ll 1$, e usa-se a expansão de Newton

$$(1 + x)^p = 1 + px + \frac{p(p-1)}{2}x^2 + \dots + x^p, \quad (2.84)$$

até a primeira ordem, no modelo **C-Y**, desta forma pode-se escrever que

$$\mu \approx \mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty) \left[1 + \frac{(n-1)}{a} \lambda^a \dot{\gamma}^a \right]. \quad (2.85)$$

Definindo $K = \frac{(n-1)}{a} \lambda^a = \text{constante}$, e além disso assumindo-se que $\mu_\infty \ll \mu$ assim $\mu - \mu_\infty \approx \mu$ e $\mu_\infty \ll \mu_0$ então $\mu_0 - \mu_\infty \approx \mu_0$. Logo

$$\mu \approx \mu_0 + \mu_0 K \dot{\gamma}^a, \quad (2.86)$$

ou ainda se considerar $C = \mu_0 K = \text{constante}$ e $a = m - 1$, então $\mu = \mu_0 + C\dot{\gamma}^{m-1}$. Note, finalmente, que a menos do termo μ_0 o limite assintótico do modelo C-Y se reduz ao modelo power-law.

- **Modelo de Cross-(1965)** Este modelo é dado por

$$\frac{\mu_0 - \mu}{\mu - \mu_\infty} = [k\dot{\gamma}]^m. \quad (2.87)$$

Fazendo-se as mesmas considerações anteriores para o limite assintótico, pode-se mostrar que o modelo de Cross se reduz, também, ao modelo power-law. Isto é, se $\mu \ll \mu_0 \Rightarrow \mu_0 - \mu \approx \mu_0$ e $\mu_\infty \ll \mu \Rightarrow \mu - \mu_\infty \approx \mu$. Então $\mu/\mu_0 \approx (k\dot{\gamma})^{-m}$ ou, assumindo-se, $-m = n - 1$ e $\mu_0 k^{-m} = c = \text{constante}$, então $\mu = c\dot{\gamma}^{n-1}$.

Este modelo será utilizado nos próximos capítulos a fim de se ter $\mu = \mu(De)$, com $De = \tau\dot{\gamma}$.

- **Modelo de Herckell-Bulkley** combina o modelo de Bingham e power-law, do seguinte modo.

$$\mu(\dot{\gamma}) = \begin{cases} 0; & |\sigma| \leq \sigma_0 \\ K\dot{\gamma}^{n-1} + \frac{\sigma_0}{\dot{\gamma}}; & |\sigma| \geq \sigma_0. \end{cases} \quad (2.88)$$

Este modelo é utilizado em fluidos de perfuração na indústria petroquímica.

- **Modelo de Casson** é utilizado para fluidos como o sangue, e é dado por

$$\mu(\dot{\gamma}) = \begin{cases} \infty; & |\sigma| \leq \sigma_0 \\ \mu_\infty(\phi) + \frac{\sigma_0}{\dot{\gamma}} + \beta \frac{1}{\sqrt{\dot{\gamma}}}; & |\sigma| > \sigma_0, \end{cases} \quad (2.89)$$

ϕ é a fração volumétrica de eritrócitos. Uma estimativa para o parâmetro β é $\beta = 2(\mu_\infty\sigma_0)^{1/2}$. No caso mais geral tem-se que a viscosidade é dada por

$$\mu(\dot{\gamma}) = \mu_\infty(\phi) + \frac{\sigma_0}{\dot{\gamma}} + \beta\dot{\gamma}^{-n}. \quad (2.90)$$

2.6 Viscoelasticidade Linear

Com a finalidade de caracterizar o comportamento de um fluido complexo, apresenta-se nesta seção alguns modelos matemáticos que capturam de uma forma mais geral a resposta viscoelástica de um material. Na viscoelasticidade linear de fluidos não-newtonianos, se analisa a descrição da resposta viscoelástica através do efeito viscoso, que tem a haver com a dissipação de energia, e do efeito elástico, que está associado com a restauração ou armazenamento de energia, e a este último associa-se um tempo de relaxação principal do fluido τ_p . Nesta seção, restringi-se a pequenos gradientes de deformação e taxas de

cisalhamento. Deste modo, tem-se que a morfologia das misturas poliméricas não é afetada. Além disto pode-se assumir, matematicamente, que:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} \sim \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}, \quad (2.91)$$

aqui \mathbf{u} é o campo de deslocamento. Este resultado se deve ao fato de que $\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} \approx \lambda^2$, sendo λ uma escala típica de comprimento do fenômeno em análise, que suspostamente é $\lambda \ll 1$. Defini-se a deformação⁷ como sendo $\gamma = \gamma(t)$ e deste modo tem-se $\dot{\gamma} = d\gamma/dt$ como a taxa de deformação⁸. Como a deformação é adimensional então $\dot{\gamma}$ possui unidade de s^{-1} , isto é, possui unidade de frequência. Por fim é pela ação do cisalhamento (que depende de $\dot{\gamma}$) que provoca-se a excitação no fluido, o qual responderá a esta ação.

Nas seções de (2.7) até (2.10) tem-se os tipos de escoamento mais utilizados para caracterizar líquidos poliméricos.

2.7 Cisalhamento Simples

O campo de velocidade de um cisalhamento simples é dado por $\mathbf{u} = (\dot{\gamma}x_2, 0, 0)$, no qual $\dot{\gamma} = du/dx_2$, u é a velocidade na direção do escoamento e x_2 é a direção normal ao escoamento (direção do gradiente de velocidade). O tensor de tensões total será dado pela equação

$$\boldsymbol{\Sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.92)$$

em que p é pressão e \mathbf{I} é o tensor identidade. Explicita-se as entradas do tensor $\boldsymbol{\Sigma}$ na matriz abaixo,

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} -p + \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & -p + \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & -p + \sigma_{33} \end{pmatrix}.$$

Medidas experimentais mostram que nos escoamentos de cisalhamento simples de fluidos incompressíveis apenas três medidas de tensões são possíveis e portanto de maior interesse, são elas: A tensão de cisalhamento σ_{12} ; a primeira diferença de tensões normais, representada por $N_1 = \sigma_{11} - \sigma_{22}$ e a segunda diferença de tensões normais dada por $N_2 = \sigma_{22} - \sigma_{33}$,

⁷No inglês se diz *strain*

⁸No inglês se diz *shear rate*

de modo que três funções materiais são de maior interesse em escoamentos de cisalhamento simples em regime permanente. A saber:

- **A viscosidade aparente:**

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\sigma_{12}}{\dot{\gamma}}. \quad (2.93)$$

- **O primeiro coeficiente de tensões normais:**

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) = \frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{\dot{\gamma}^2}. \quad (2.94)$$

- **O segundo coeficiente de tensões normais:**

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) = \frac{\sigma_{22} - \sigma_{33}}{\dot{\gamma}^2}. \quad (2.95)$$

Além das funções materiais em regime permanente, um fluido é ainda caracterizado por experimentos em regime transiente, nos quais novas funções materiais são obtidas, por este motivo apresenta-se o cisalhamento oscilatório abaixo.

2.8 Cisalhamento Oscilatório

Neste cisalhamento, considera-se a deformação oscilatória como sendo: $\gamma(t) = \gamma_0 \sin(\omega t)$, em que ω é a frequência de excitação e a deformação inicial γ_0 é tal que $\gamma_0 \ll 1$. Usa-se ω e γ_0 , nestes termos, como parâmetros de entrada deste cisalhamento.

Desta forma

$$\dot{\gamma}(t) = \frac{d\gamma}{dt} = \gamma_0 \omega \cos(\omega t), \quad (2.96)$$

da equação (2.96) define-se: $\dot{\gamma}_0 = \gamma_0 \omega$ e então $\dot{\gamma}(t) = \dot{\gamma}_0 \cos(\omega t)$.

Devido à excitação gerada pelo cisalhamento, que neste caso é oscilatório, tem-se como resposta dada pelo fluido a tensão $\sigma(t)$. Se propõe escrever $\sigma(t)$ como sendo

$$\sigma(t) = A(\omega) \gamma_0 \sin(\omega t + \alpha), \quad \text{para } 0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}, \quad (2.97)$$

ou

$$\sigma(t) = B(\omega) \dot{\gamma}_0 \cos(\omega t - \beta), \quad \text{para } 0 \leq \beta \leq \frac{\pi}{2}, \quad (2.98)$$

em que α é a diferença de fase entre a onda de deformação e a resposta da tensão e $\beta = \pi/2 - \alpha$. Pode-se ainda representar as equações (2.97) e (2.98) em termos das componentes da tensão em fase e fora de fase com γ_0 e $\dot{\gamma}_0$, do seguinte modo

$$\sigma(t) = G'(\omega)\gamma_0 \sin(\omega t) + G''(\omega)\gamma_0 \cos(\omega t), \quad (2.99)$$

ou ainda

$$\sigma(t) = \eta'(\omega)\dot{\gamma}_0 \cos(\omega t) + \eta''(\omega)\dot{\gamma}_0 \sin(\omega t). \quad (2.100)$$

Define-se $G'(\omega)$, componente em fase com γ , como sendo o módulo elástico de cisalhamento⁹ e $G''(\omega)$, componente em fase com $\dot{\gamma}$ como sendo o módulo viscoso. O termo $\eta'(\omega)$, componente em fase com $\dot{\gamma}$, é chamado de primeiro coeficiente viscoso ou viscosidade de cisalhamento dinâmica. E finalmente $\eta''(\omega)$, componente em fase com γ , é o segundo coeficiente de viscosidade. Estes termos são funções viscoelásticas ou módulos viscoelásticos do fluido. Devido a G' , G'' , η' e η'' determinarem a tensão de cisalhamento, que é uma função linear com a deformação (ou da taxa de deformação), estas funções materiais são designadas por propriedades viscoelásticas lineares. É importante relatar que para um sólido elástico perfeito, tem-se que $G''(\omega) = 0$ e ainda $\sigma(t) = G'(\omega)\gamma(t)$. Para um fluido Newtoniano, tem-se que $\eta''(\omega) = 0$ e $\sigma(t) = \eta'(\omega)\dot{\gamma}(t)$ [8].

Expandindo as equações (2.97) e (2.98) e comparando termo a termo com as equações (2.99) e (2.100), respectivamente, tem-se

$$\begin{cases} G'(\omega) = A(\omega) \cos(\alpha) \text{ e } G''(\omega) = A(\omega) \sin(\alpha) \\ \eta'(\omega) = B(\omega) \cos(\beta) \text{ e } \eta''(\omega) = B(\omega) \sin(\beta). \end{cases} \quad (2.101)$$

Da equação (2.101) concluímos que $(A(\omega))^2 = (G'(\omega))^2 + (G''(\omega))^2$ e ainda $(B(\omega))^2 = (\eta'(\omega))^2 + (\eta''(\omega))^2$. Diante disto, é natural definir $G^*(\omega) = G'(\omega) + iG''(\omega)$ como sendo o módulo complexo e $\eta^*(\omega) = \eta'(\omega) - i\eta''(\omega)$ como sendo a viscosidade complexa e $i^2 = -1$ é a unidade imaginária dos números complexos. Note que a viscosidade complexa $\eta^*(\omega)$ é o conjugado do módulo complexo $G^*(\omega)$, isto é, $\overline{G^*(\omega)} = \eta^*(\omega)$.

Pode-se ainda fazer o estudo que foi feito acima, utilizando-se das variáveis complexas. Para isto lembre-se, inicialmente, da relação de Euler, $e^{i\theta} = \cos(\theta) + i \sin(\theta)$. Deste modo,

⁹No inglês se diz *storage modulus*

é comum usar a excitação imposta com o sistema oscilando com uma frequência ω escrita na forma:

$$\gamma(t) = \gamma_0 e^{i\omega t}. \quad (2.102)$$

Assim a taxa de cisalhamento do sistema é dada pela equação:

$$\dot{\gamma}(t) = i\omega\gamma_0 e^{i\omega t}, \quad (2.103)$$

e defini-se a amplitude da taxa de cisalhamento como sendo $\dot{\gamma}_0 = i\omega\gamma_0$. A resposta desta excitação escrita em termos da tensão de cisalhamento, será da forma:

$$\sigma(t) = \tilde{\sigma}_0 e^{i(\omega t + \varphi)}, \quad (2.104)$$

ou pode ser da forma

$$\sigma(t) = \sigma' e^{i\omega t}, \quad (2.105)$$

com $\sigma' = \tilde{\sigma}_0 e^{i\varphi}$ sendo a amplitude complexa.

Defini-se, ainda, a tensão de cisalhamento em termos da deformação γ_0 ou da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}_0$, através das duas equações que se seguem:

$$\sigma(t) = \gamma_0 G^*(\omega) e^{i\omega t}, \quad (2.106)$$

ou

$$\sigma(t) = \dot{\gamma}_0 \eta^*(\omega) e^{i\omega t}. \quad (2.107)$$

Destas duas últimas equações, mostra-se as relações entre os coeficientes viscoelásticos como sendo:

$$G'(\omega) = \omega\eta''(\omega) \text{ e } G''(\omega) = \omega\eta'(\omega), \quad (2.108)$$

diante da equação (2.108) é comum chamar, também, η' de módulo viscoso e η'' de módulo elástico.

É habitual realizar experimentos em cisalhamento oscilatório para averiguar a faixa de viscoelasticidade linear do fluido. Dos experimentos de viscoelasticidade linear pode-se determinar a viscosidade do fluido e o tempo de relaxação principal τ_p . Para isto é definido uma frequência de oscilação, f , ($\omega = 2\pi f$; com $1 \leq \omega \leq 10 \text{ rad/s}$ uma variação típica) na qual é avaliado G' e G'' em função da amplitude $10^{-2} \leq \gamma_0 \leq 1$. A região linear é detectada no intervalo em que G' e G'' não dependem de γ_0 . Este experimento é designado por teste

de varredura de amplitude¹⁰. Para detectar quando o material passa de um comportamento predominantemente sólido para um comportamento predominantemente líquido, seleciona-se um γ_0 dentro do regime linear e varia-se a frequência $10^{-1} \leq \omega \leq 100 \text{ rad/s}$. A este último experimento dá-se o nome de Teste de Varredura de Frequência¹¹. O ponto em que a curva de G' intersecta a curva de G'' é designado de ponto crítico¹² [23].

Define-se abaixo o campo de velocidade típico de um cisalhamento oscilatório e que será utilizado neste trabalho.

$$\mathbf{u}(t) = (\dot{\gamma}_0 x_2 \cos(\omega t), 0, 0). \quad (2.109)$$

2.9 Escoamento Extensional Permanente

O escoamento extensional permanente ou escoamento elongacioanal possui o campo de velocidade dado, de um modo geral, pela seguinte relação [8]

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (u_1(\mathbf{x}), u_2(\mathbf{x}), u_3(\mathbf{x})), \quad (2.110)$$

em que $\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ x_3)^T \in \mathbb{R}^3$ e

$$\begin{cases} u_1(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}(1+b)x_1, \\ u_2(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}(1-b)x_2, \\ u_3(\mathbf{x}) = +\dot{\epsilon}x_3, \end{cases} \quad (2.111)$$

em que $0 \leq b \leq 1$ é um parâmetro dado e $\dot{\epsilon}$ é a taxa de estiramento ou alongação, que pode depender do tempo. Para escolhas particulares do parâmetro b tem-se os seguintes escoamentos:

- Uniaxial se $b = 0$ e $\dot{\epsilon} > 0$,
- Biaxial se $b = 0$ e $\dot{\epsilon} < 0$,
- Planar se $b = 1$.

¹⁰No inglês se diz *Amplitude Sweep Test*

¹¹No inglês se diz *Frequency Sweep Test*

¹²No inglês se diz *Yield Point*

Neste trabalho será usado, porém, o escoamento extensional que possui o seguinte campo de velocidade,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \left(\dot{\epsilon}x_1, -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}x_2, -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}x_3 \right). \quad (2.112)$$

Para esses tipos de escoamentos o tensor de tensões total Σ , como na equação (2.92), é dado por

$$\Sigma = \begin{pmatrix} -p + \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & -p + \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & -p + \sigma_{33} \end{pmatrix}.$$

As medidas de interesse para este escoamento são as duas diferenças de tensões normais, N_1 e N_2 , e a função material viscosidade extensional μ_e dada, como uma primeira definição, pela expressão

$$\mu_e(\dot{\epsilon}) = \frac{2\sigma_{11} - \sigma_{22} - \sigma_{33}}{2\dot{\epsilon}}. \quad (2.113)$$

É importante determinar como seria a viscosidade de um fluido Newtoniano sujeito a um escoamento extensional permanente. Tem-se que o modelo geral de um tensor de tensões de um fluido Newtoniano é da forma:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu_s \mathbf{D}. \quad (2.114)$$

Usando a equação (2.112) determina-se o tensor de deformação \mathbf{D} e em seguida, pela equação (2.114), obtém-se, desprezando o termo da pressão mecânica, as tensões normais: $\sigma_{11} = 2\mu_s \dot{\epsilon}$ e $\sigma_{22} = \sigma_{33} = -\mu_s \dot{\epsilon}$. Substituindo na equação (2.113) conclui-se que a viscosidade extensional de um fluido Newtoniano para este tipo de escoamento é $\mu_e = 3\mu_s$. Esta relação é definida como viscosidade de Trouton [22]. Desta maneira, para se normalizar¹³ a viscosidade extensional usa-se uma segunda proposta para a viscosidade extensional dada por:

$$\mu_e(\dot{\epsilon}) = \frac{2\sigma_{11} - \sigma_{22} - \sigma_{33}}{6\dot{\epsilon}}. \quad (2.115)$$

E agora, com as mesmas tensões normais determinadas anteriormente, substituídas na equação (2.115) é imediato verificar que $\mu_e = \mu_s$.

¹³Isto é, fazer com que a viscosidade extensional de um fluido Newtoniano seja igual a própria viscosidade μ_s do fluido.

2.10 Impulso de Deformação Aplicada.

O impulso de deformação (no inglês “*step-strain*”) é um escoamento utilizado para a caracterização dos efeitos de memória de um dado fluido complexo, visto que permite a obtenção de sua função relaxação de tensão Φ e, a partir desta, do tempo de relaxação principal τ_p , como se verá logo adiante.

No escoamento por impulso de deformação, considera-se o fluido inicialmente em repouso e em um determinado instante de tempo t_0 aplica-se uma taxa de cisalhamento (ou uma excitação) por um curto espaço de tempo $dt \ll 1$ s. E em seguida, se observa como a tensão de cisalhamento $\sigma_{12}(t)$ relaxa no tempo.

Matematicamente este campo de velocidade pode ser considerado como:

$$\mathbf{u}(t) = (\dot{\gamma}(t)x_2, 0, 0), \quad (2.116)$$

em que $\dot{\gamma}(t) = \gamma_0 \vartheta(t - t_0)$ e a função $\vartheta(t - t_0)$ é dada por:

$$\vartheta(t - t_0) = \begin{cases} \frac{1}{dt}, & t_0 \leq t \leq t_0 + dt; \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases} \quad (2.117)$$

Lembre-se que $\gamma_0 \ll 1$ é a deformação inicial e ressalta-se que dt é o passo de tempo experimental utilizado, que normalmente é bem menor que 1 s. Note ainda que deste modo tem-se que $\dot{\gamma}(t) = \gamma_0/dt$, para $t \in [t_0, t_0 + dt]$. Na figura (2.8) tem-se uma representação esquemática da aplicação do impulso de deformação constante γ_0 em t_0 no intervalo de tempo dt .

Da figura (2.8) conclui-se que a deformação $\gamma(t)$ e a taxa de deformação $\dot{\gamma}(t)$ são dadas, respectivamente, pelas funções:

$$\gamma(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } t < t_0; \\ \frac{\gamma_0(t - t_0)}{dt}, & \text{se } t \in [t_0, t_0 + dt]; \\ \gamma_0, & \text{se } t > t_0 + dt. \end{cases} \quad (2.118)$$

E

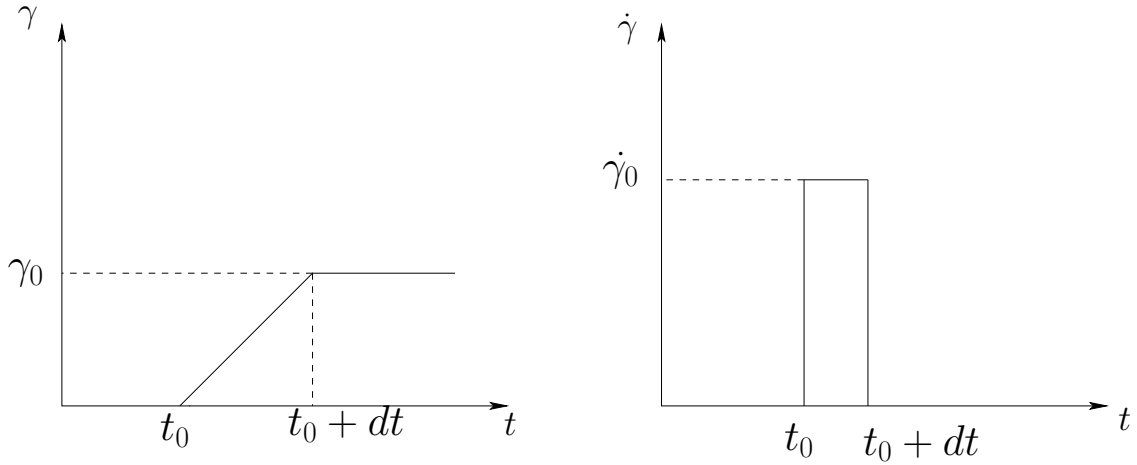


Figura 2.8: Representação esquemática da taxa de deformação e taxa de cisalhamento do escoamento por taxa de deformação aplicada.

$$\dot{\gamma}(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } t < t_0; \\ \frac{\gamma_0}{dt}, & \text{se } t \in [t_0, t_0 + dt]; \\ 0, & \text{se } t > t_0 + dt. \end{cases} \quad (2.119)$$

Na seção (2.12) tem-se novamente este escoamento no qual o interesse será apresentar uma relação entre a tensão σ e a função relaxação de tensão Φ (definida na próxima seção), no caso em que dt tende a zero.

2.11 Modelo Constitutivo de Maxwell para Viscoelasticidade Linear

A teoria matemática de viscoelasticidade linear tem como base a superposição de efeitos e a resposta da tensão do fluido em qualquer tempo é diretamente proporcional à taxa de deformação $\dot{\gamma}$, incluindo derivadas temporais em σ e $\dot{\gamma}$ [8]. No regime de pequenas deformações as derivadas que aparecem nestes modelos são lineares.

Uma equação diferencial geral para regime de viscoelasticidade linear foi proposto por Oldroyd [49] e é da forma

$$\left(1 + \alpha_1 \frac{\partial}{\partial t} + \alpha_2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \dots + \alpha_n \frac{\partial^n}{\partial t^n}\right) \sigma = \left(\beta_0 + \beta_1 \frac{\partial}{\partial t} + \beta_2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \dots + \beta_n \frac{\partial^n}{\partial t^n}\right) \dot{\gamma}, \quad (2.120)$$

em que $n = m$ ou $n = m - 1$. Os coeficientes materiais que aparece neste modelo independem de $\boldsymbol{\gamma}$ ou $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ e da própria tensão.¹⁴

O primeiro dos modelos de comportamento molecular propostos para caracterização de um fluido viscoelástico foi proposto por Maxwell [4],[9] e baseava-se numa analogia com o sistema mecânico mola-amortecedor (elemento elástico-elemento viscoso). Neste sistema mecânico uma deformação súbita originará uma resposta essencialmente elástica observando-se, também neste caso, à semelhança de um fluido viscoelástico, a capacidade do sistema em relaxar as tensões inicialmente desenvolvidas no processo de deformação ao fim de algum tempo.

No modelo proposto por Maxwell consideram-se $\alpha_1 = \alpha = \eta/G$ e $\beta_1 = \eta_0 = \eta$ e ainda os demais coeficientes iguais a zero na equação (2.120). Assim usando-se de escoamentos unidirecionais tem-se que $\boldsymbol{\sigma} \rightarrow \sigma$ e $\boldsymbol{\gamma} \rightarrow \gamma$ e então a equação (2.120) ficará

$$\sigma + \alpha \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial \gamma}{\partial t} = \beta_1 \dot{\gamma}. \quad (2.121)$$

Como dito acima, este modelo surgiu pois Maxwell idealizou o fluido com um parte elástica (E) e uma parte viscosa (V) e as tensões $\sigma_E = G\gamma_E$, devido ao modelo de Hooke e $\sigma_V = \eta\dot{\gamma}_V$, devido ao modelo viscoso de Newton. Maxwell usou ainda $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_E + \dot{\gamma}_V$ e o balanço de tensões $\sigma = \sigma_V = \sigma_E$. Assim, $\dot{\sigma}_E = G\dot{\gamma}_E$ e $\dot{\sigma}_V = \eta\dot{\gamma}_V$ e desta forma tem-se a equação

$$\eta\dot{\gamma} = \frac{\eta}{G}\dot{\sigma}_E + \sigma_V, \quad (2.122)$$

e fazendo $\alpha = \frac{\eta}{G}$ e $\beta_1 = \eta$, tem-se a equação (2.121). A interpretação física dada para este modelo pode ser descrita como um sistema mola-amortecedor em série, no qual a constante da mola é dada por G com deslocamento γ , e um amortecedor com constante de amortecimento η e taxa de amortecimento $\dot{\gamma}$.

A equação em (2.121) é uma EDO linear cuja solução é

$$\sigma(t) = \frac{\eta}{\alpha} \int_{-\infty}^t \exp(-(t-t')/\alpha) \dot{\gamma}(t') dt', \quad (2.123)$$

os limites de integração são devidos ao fato do fluido possuir memória, isto é, a tensão σ avaliada no tempo t depende da história da taxa de deformação para todo o tempo t'

¹⁴Por exemplo em viscoelasticidade linear temos que: $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = 2\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$.

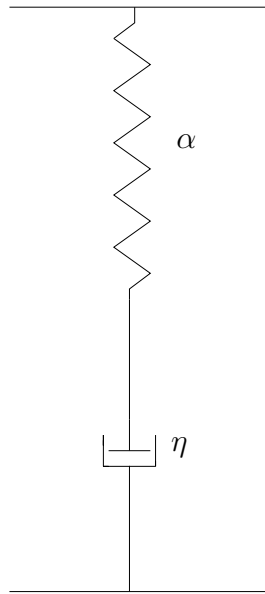


Figura 2.9: Modelo ilustrativo de um elemento de Maxwell. Em η tem-se representado o elemento viscoso e em α tem-se o elemento elástico.

anterior a t , ou de maneira geral, $-\infty < t' \leq t$. A integral que se vê na equação (2.123) é chamada de integral de convolução.

Definindo a função,

$$\Phi(t - t') = \frac{\eta}{\alpha} \exp(-(t - t')/\alpha), \quad (2.124)$$

pode-se reescrever a equação (2.123) como:

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t \Phi(t - t') \dot{\gamma}(t') dt'. \quad (2.125)$$

A função $\Phi(t - t')$ é chamada de função memória de Maxwell ou função relaxação de tensão (no inglês “*stress relaxation function*”). Perceba que $\Phi(t - t')$ é uma função positiva e dependente do tipo de fluido analisado (tem-se η como um coeficiente de Φ), e ainda observa-se que $\Phi(t - t')$ tende a zero à medida que $(t - t')$ torna-se suficientemente grande. A equação (2.125) deve ser vista sob o princípio da causalidade, o qual afirma que a tensão depende da história do carregamento, i.e., a tensão no tempo presente t depende da taxa de deformação ou história de deformação em tempos anteriores t' . Neste contexto, a exponencial vista na equação (2.124) pode ser entendida como um fator multiplicativo e que assume valores maiores para tempos mais próximos do tempo t , e menores para tempos distantes de t , indicando portanto que a tensão é mais suscetível à história mais recente de deformação.

Em função disto, diz-se que fluidos de Maxwell apresentam memória, já que seu estado atual depende de estados passados e, além disso, sua memória decresce rapidamente para eventos que tenham ocorrido em instantes de tempo mais afastados do presente, mostrando que este modelo se adéqua ao princípio de *fading memory*, como visto na seção (2.3).

Ao analisar um pouco mais as equações (2.123) e (2.125), propõe-se a seguinte mudança de variável $s = s(t) = t - t'$, deste modo, tem-se

$$\Phi(s) = \frac{\eta}{\alpha} \exp(-s/\alpha), \quad (2.126)$$

e assim $\sigma(t)$ escreve-se agora como:

$$\sigma(t) = \frac{\eta}{\alpha} \int_{-\infty}^t \exp(-(t-t')/\alpha) \dot{\gamma} dt' = \frac{\eta}{\alpha} \int_0^{+\infty} \exp(-s/\alpha) \dot{\gamma} ds. \quad (2.127)$$

Neste ponto do trabalho se utilizará a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}(t')$ como descrito no cisalhamento oscilatório, na seção (2.8), i.e., $\dot{\gamma}(t') = \dot{\gamma}_0 \cos(\omega t')$, usando-a no modelo de viscoelasticidade linear de Maxwell, equação (2.125), a tensão $\sigma(t)$ ficará:

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t \Phi(t-t') \dot{\gamma}_0 \cos(\omega t') dt', \quad (2.128)$$

e fazendo novamente $s = s(t) = t - t' \Leftrightarrow t' = t - s$ e usando a identidade trigonométrica $\cos(\omega t - \omega s) = \cos(\omega t) \cos(\omega s) + \sin(\omega t) \sin(\omega s)$, obtém-se

$$\sigma(t) = \left(\int_0^{+\infty} \Phi(s) \cos(\omega s) ds \right) \dot{\gamma}_0 \cos(\omega t) + \left(\int_0^{+\infty} \Phi(s) \sin(\omega s) ds \right) \dot{\gamma}_0 \sin(\omega t), \quad (2.129)$$

e comparando a equação (2.129) com a equação (2.100), tem-se, finalmente, as importantes relações:

$$\eta'(\omega) = \int_0^{+\infty} \Phi(s) \cos(\omega s) ds \quad \text{e} \quad \eta''(\omega) = \int_0^{+\infty} \Phi(s) \sin(\omega s) ds. \quad (2.130)$$

Como tem-se, por definição, que $\eta^* = \eta' - i\eta''$ então pode-se ainda escrever η^* na forma

$$\eta^*(\omega) = \int_0^{+\infty} \Phi(s) \exp(-i\omega s) ds; \quad i^2 = -1. \quad (2.131)$$

Sabe-se ainda do cálculo integral e diferencial que, usando-se a transformada de Fourier cosseno ou seno, pode-se obter a função $\Phi(s)$ de duas maneiras diferentes, a saber:

$$\Phi(s) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \eta'(\omega) \cos(\omega s) d\omega \quad \text{e} \quad \Phi(s) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \eta''(\omega) \sin(\omega s) d\omega, \quad (2.132)$$

sendo a primeira equação a transformada de Fourier cosseno e a segunda equação a transformada de Fourier seno.

Neste ponto defini-se o limite, $\lim_{\omega \rightarrow 0} \eta'(\omega) = \eta_0 = \mu_s$, como sendo a viscosidade efetiva da suspensão polimérica, então usando a equação (2.130), pode-se escrever

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \eta'(\omega) = \eta_0 = \mu_s = \int_0^{+\infty} \Phi(s) ds, \quad (2.133)$$

vale ressaltar que dos experimentos de viscoelasticidade linear consegue-se obter, também, o mesmo resultado da equação (2.133).

Mostra-se que, para o cisalhamento oscilatório de um fluido de Maxwell, no caso bidimensional, as quatro relações que se seguem:

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta^* = \frac{\eta_1}{1 + i\alpha_1\omega}; \\ \eta' = \frac{\eta_1}{1 + (\alpha_1\omega)^2}; \\ \eta'' = \frac{\eta_1\alpha_1\omega}{1 + (\alpha_1\omega)^2}; \\ G^* = \frac{i\omega\eta_1}{1 + i\alpha_1\omega}, \end{array} \right. \quad (2.134)$$

aqui $\eta_1 = \mu_s$ é a viscosidade efetiva da suspensão polimérica e α_1 é o tempo de relaxação.

Finalmente deve-se observar que pela equação (2.132), dado $\eta'(\omega)$ pode-se calcular a função $\Phi(s)$, e uma vez com a função Φ determina-se $\eta''(\omega)$, i.e, a função relaxação de tensão Φ é de extrema importância, pois, a partir dela são obtidas informações do fluido de interesse, como seu tempo de relaxação principal, seus módulos viscoelásticos e é claro μ_s .

Tem-se, também, duas importantes equações que são frequentemente utilizadas para a determinação das funções $\eta'(\omega)$ e $\eta''(\omega)$. Estas duas equações são chamadas de relações de Kramers-Kronig [8],[48] e relacionam $\eta'(\omega)$ e $\eta''(\omega)$ da seguinte forma:

$$\eta''(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\eta'(x) - \eta'(\omega)}{x^2 - \omega^2} dx \quad \text{e} \quad \eta'(\omega) - \eta'(+\infty) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{x\eta''(x) - \omega\eta''(\omega)}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (2.135)$$

Onde defini-se $\eta'(+\infty) = \lim_{\omega \rightarrow +\infty} \eta'(\omega)$. Deste modo nota-se que é preciso apenas encontrar um módulo viscoelástico, $\eta'(\omega)$ ou $\eta''(\omega)$, e assim determina-se o outro módulo usando-se a equação (2.135). Estas relações demonstram a idéia causa-efeito associada com a linearidade do acoplamento fluido-escoamento regido pelo par de transformadas de Fourier. Na seção (6.1.8) mostra-se um resultado gráfico da aplicação da equação (2.135).

Neste momento, mostra-se uma maneira de se determinar o tempo de relaxação principal α_1 por meio da função memória $\Phi(s)$, em que $s = s(t') = t - t'$. Para isto considere calcular o limite

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\eta''(\omega)/\omega}{\eta'(\omega)}, \quad (2.136)$$

em que η' e η'' são dados pela equação (2.130). Este limite é melhor se calculado por etapas, veja:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \eta'(\omega) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} \Phi(s) \cos(\omega s) ds = \int_0^{+\infty} \Phi(s) ds = \eta_0. \quad (2.137)$$

Para se determinar o limite $\lim_{\omega \rightarrow 0} \eta''(\omega)/\omega$, usa-se a regra de L'Hospital, assim

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\eta''(\omega)}{\omega} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} \frac{\Phi(s) \sin(\omega s)}{\omega} ds = \lim_{\omega \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} s \Phi(s) \cos(\omega s) ds = \int_0^{+\infty} s \Phi(s) ds = \beta.$$

Note que β possui unidade de $Pa.s^2$ e como η_0 possui unidade de $Pa.s$ então

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\eta''(\omega)/\omega}{\eta'(\omega)} = \frac{\beta}{\eta_0} = \alpha_1, \quad (2.138)$$

sendo α_1 igual ao tempo de relaxação do fluido.

2.11.1 Generalização do Modelo de Maxwell

A generalização do modelo de Maxwell [8],[9], para escoamentos com pequenos deslocamentos, como dito anteriormente, em termos do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ e do tensor taxa de deformação \mathbf{D} , é dado pela equação

$$\boldsymbol{\sigma} + \alpha_1 \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = 2\eta_0 \mathbf{D}. \quad (2.139)$$

Para um fluido incompressível viscoelástico submetido a pequenos gradientes de deslocamento ou taxa de deformação, o tensor de tensões $\boldsymbol{\Sigma}$ geral é dado por:

$$\boldsymbol{\Sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.140)$$

no qual a parte do tensor $\boldsymbol{\sigma}$, que é a parte que possui traço nulo (parte deviatória), deve ser obtida através da solução da equação (2.139). A equação (2.139) foi resolvida analiticamente e obteve-se:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \frac{2\eta_0}{\alpha_1} \int_{-\infty}^t \exp(-(t-t')/\alpha_1) \mathbf{D}(t') dt' + \mathbf{A} \exp(-t/\alpha_1). \quad (2.141)$$

Como na equação (2.123), a escolha dos limites de integração na equação (2.141) é para garantir a integral de convolução e, além do mais, especifica-se que a tensão no fluido é finita em $t = -\infty$, então a constante \mathbf{A} terá que ser necessariamente $\mathbf{A} = \mathbf{0}$. É importante avaliar o limite do integrando na equação (2.141) quanto $t \rightarrow -\infty$, desde que o numerador e denominador tendam para zero quando $t \rightarrow -\infty$. Usando a regra de L'Hospital e algumas manipulações algébricas mostra-se que a tensão $\boldsymbol{\sigma}$ no limite de $t \rightarrow -\infty$, é dada pela equação:

$$\boldsymbol{\sigma}(-\infty) = 2\eta_0 \mathbf{D}(-\infty), \quad (2.142)$$

assim se $\mathbf{D}(-\infty)$ é finito a tensão $\boldsymbol{\sigma}(-\infty)$ também o será.

Finalmente a equação (2.141), que representa o escoamento geral 3D de um fluido incompressível sujeito a pequenas deformações, possuirá a forma:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \frac{2\eta_0}{\alpha_1} \int_{-\infty}^t \exp(-(t-t')/\alpha_1) \mathbf{D}(t') dt'. \quad (2.143)$$

Note que a equação (2.143) pode ser simplificada para o caso de um escoamento unidirecional. Para isto faça $\mathbf{D}(t') \rightarrow \dot{\gamma}(t')$ e $\eta = 2\eta_0$, então tem-se novamente a equação (2.123). Olhando o termo exponencial da equação (2.143) pode-se concluir que quanto mais tempo tenha passado, isto é, $t' \ll t$, então a tensão $\boldsymbol{\sigma}$ é menos alterada, enquanto que para tempos mais curtos, isto é, $t' \approx t$, a tensão será mais afetada pela história de deformação. Este fator exponencial que afeta a história da tensão do fluido é chamado de módulo de relaxação do fluido de Maxwell e é dado por:

$$\frac{2\eta_0}{\alpha_1} \int_{-\infty}^t \exp[-(t-t')/\alpha_1]. \quad (2.144)$$

Uma forma equivalente da equação integral constitutiva do modelo de Maxwell, pode ser dada em termos do tensor deformação ou tensor de deformação de Cauchy, $\mathbf{F}(t)$, que é definido como sendo

$$\mathbf{F}(t) = \int_{-\infty}^t \mathbf{D}(t') dt'. \quad (2.145)$$

Ao integrar por partes a equação (2.143), obtém-se:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \frac{2\eta_0}{(\alpha_1)^2} \int_{-\infty}^t \exp[-(t-t')/\alpha_1] [\mathbf{F}(t) - \mathbf{F}(t')] dt', \quad (2.146)$$

o termo $[\mathbf{F}(t) - \mathbf{F}(t')]$ é chamado de deformação relativa no tempo t em relação ao tempo t' . Note que este termo muda sempre que se altera os tempos em questão. Assim, diferente de

um sólido elástico, não se tem um estado de referência (num tempo t_0 inicial) único, para ser usado numa descrição de deformação. O termo dado por $[2\eta_0/(\alpha_1)^2] \exp [-(t-t')/\alpha_1]$ também é chamado de função memória.¹⁵

Mostra-se abaixo um limite assintótico para o modelo de Maxwell dado pela equação (2.143), para pequenos tempos de relaxação, i.e., $\alpha_1 \ll 1$. Para isto faz-se integração por partes na referida equação, e obtém-se:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = 2\eta_0\mathbf{D}(t) - 2\eta_0 \int_{-\infty}^t \exp [-(t-t')/\alpha_1] \frac{\partial \mathbf{D}(t')}{\partial t} dt', \quad (2.147)$$

e assumi-se que $\mathbf{D}(-\infty)$ é finito. O primeiro termo da equação (2.147) é referente à parte newtoniana do fluido, enquanto que o segundo termo se refere à parte viscoelástica. Pode-se usar novamente integração por partes na equação (2.147), na parte referente à viscoelásticidade. Deste modo, obtém-se para a tensão a expressão dada pela equação:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = 2\eta_0\mathbf{D}(t) - 2\eta_0\alpha_1 \frac{\partial \mathbf{D}(t)}{\partial t} + 2\eta_0\alpha_1 \int_{-\infty}^t \exp [-(t-t')/\alpha_1] \frac{\partial^2 \mathbf{D}(t')}{\partial t'^2} dt'. \quad (2.148)$$

Este processo pode ser repetido m vezes e desta maneira conclui-se sua expressão geral dada pela equação:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = 2\eta_0\mathbf{D}(t) - 2 \sum_{k=1}^m \eta_0\alpha_1^k \frac{\partial^k \mathbf{D}(t)}{\partial t^k} + 2\eta_0\alpha_1^k \int_{-\infty}^t \exp [-(t-t')/\alpha_1] \frac{\partial^k \mathbf{D}(t')}{\partial t'^k} dt'. \quad (2.149)$$

Veja-se como ficará a tensão $\boldsymbol{\sigma}$ quando utiliza-se apenas três termos da expressão dada pela equação (2.149), isto é,

$$\boldsymbol{\sigma}(t) \approx 2\eta_0\mathbf{D}(t) - 2\eta_0\alpha_1 \frac{\partial \mathbf{D}(t)}{\partial t} + 2\eta_0\alpha_1^2 \frac{\partial^2 \mathbf{D}(t)}{\partial t^2} + \mathcal{O}(\alpha_1^3). \quad (2.150)$$

Pode-se ainda assumir, de forma equivalente, que $\boldsymbol{\sigma}(t) = \sum_{k=1}^{+\infty} \boldsymbol{\sigma}_k(t)$, em que tem-se:

$$\boldsymbol{\sigma}_k(t) = -\alpha_k \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_k}{\partial t} + 2\eta_k \mathbf{D}(t). \quad (2.151)$$

Assim o modelo mais geral seria dado pela equação

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_{-\infty}^t \left[\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\eta_k}{\alpha_k} \exp [-(t-t')/\alpha_k] \right] \mathbf{D}(t') dt', \quad (2.152)$$

com $\alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3 > \dots$

¹⁵No inglês se diz *fading memory*

Neste ponto, defini-se a função relaxação de tensões, para o caso geral, dada pela equação

$$\Phi(s) = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\eta_k}{\alpha_k} \exp(-s/\alpha_k), \quad (2.153)$$

em que $s = t - t'$. Note que aqui tem-se infinitas constantes α_k e η_k para se determinar. Estas constantes são os espectros de tempos de relaxação e de viscosidade, respectivamente. No entanto pode-se reduzir o número de parâmetros para somente três usando as relações de Rouse [8], do seguinte modo: Dados η_0, α e b então $\eta_k = \eta_0 \frac{\alpha_k}{S}$, na qual $S = \sum_{k=1}^{+\infty} \alpha/k^b$. Sabe-se empiricamente que o parâmetro b pertence ao intervalo real $(2, 4)$ para suspensões poliméricas.

Experimentalmente, na prática como se verá adiante na seção (3.3.2), considera-se apenas N elementos de Maxwell em um regime viscoelástico linear. Sendo assim a relaxação de uma dada tensão aplicada a um material complexo se desenvolve como um efeito combinado da relaxação dos N elementos de Maxwell que o compõem, ou seja, existem N tempos de relaxação que caracterizam a escala típica de um fluido complexo neste regime de escoamento. Pode-se, portanto, escrever a função relaxação de tensão considerando os N elementos de Maxwell, da seguinte maneira:

$$\Phi(s) = \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\alpha_k} \exp(-s/\alpha_k), \quad (2.154)$$

em que $s = t - t'$. Na figura (2.10) tem-se uma representação esquemática deste modelo.

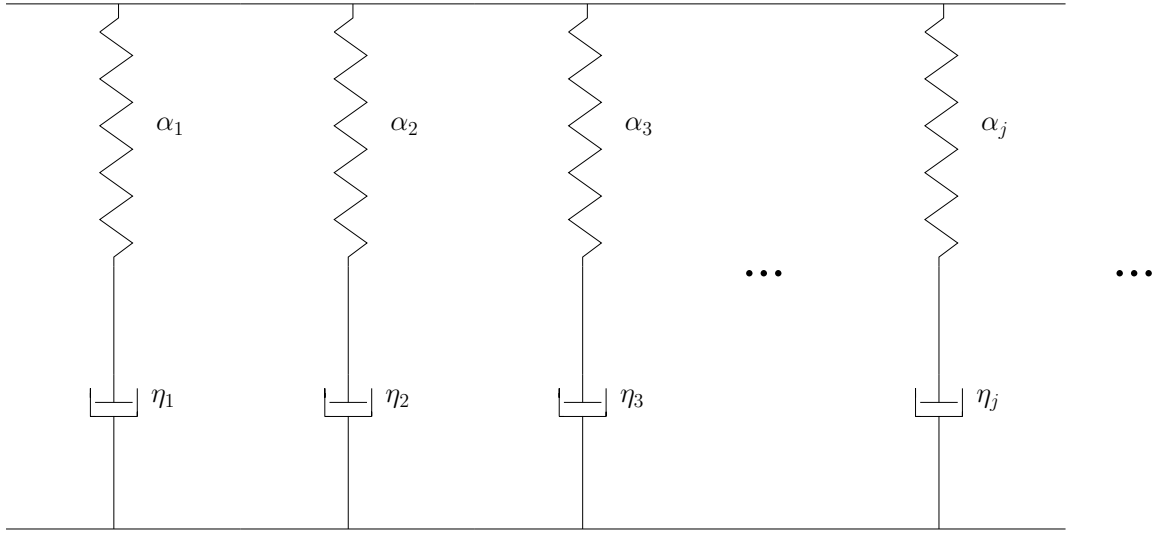


Figura 2.10: Modelo esquemático de um fluido complexo formado por N elementos de Maxwell.

2.11.2 Cálculo do η' e η'' para o modelo geral de Maxwell

Nesta seção mostra-se como ficam as expressões de $\eta'(\omega)$ e $\eta''(\omega)$, utilizando-se das equações em (2.130) e da expressão geral da função memória

$$\Phi(s) = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\eta_k}{\alpha_k} \exp(-s/\alpha_k), \quad (2.155)$$

do fluido de Maxwell [28],[9]. Ao substituir esta última equação nas equações em (2.130) obtém-se:

$$\eta'(\omega) = \int_0^{+\infty} \left[\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\eta_k}{\alpha_k} \exp(-s/\alpha_k) \right] \cos(\omega s) ds = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\eta_k}{1 + (\alpha_k \omega)^2}, \quad (2.156)$$

$$\eta''(\omega) = \int_0^{+\infty} \left[\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\eta_k}{\alpha_k} \exp(-s/\alpha_k) \right] \sin(\omega s) ds = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\eta_k \alpha_k \omega}{1 + (\alpha_k \omega)^2}. \quad (2.157)$$

Note que diferentemente das expressões obtidas em (2.134) aqui vê-se infinitos tempos de relaxação do fluido. Neste ponto pode-se introduzir [8] as expressões semi-empíricas de Roux (Doi-Edwards), de maneira que dados $\alpha_1 > 1$ e η_0 calcula-se η_k e α_k , da seguinte forma:

$$\eta_k = \eta_0 \frac{\alpha_k}{\sum_{k=1}^{+\infty} \alpha_k}, \quad \text{em que } \alpha_k = \frac{\alpha_1}{k^{\alpha_1}}, \quad (2.158)$$

e então utilizando-se a razão para $\eta'(\omega)$ tem-se

$$\frac{\eta'(\omega)}{\eta_0} = \frac{1}{\zeta(\alpha_1)} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{k^{\alpha_1}}{k^{2\alpha_1} + (\alpha_1\omega)^2}. \quad (2.159)$$

E para $\eta''(\omega)$ usa-se,

$$\frac{\eta''(\omega)}{\eta_0} = \frac{\alpha_1\omega}{\zeta(\alpha_1)} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{k^{2\alpha_1} + (\alpha_1\omega)^2}, \quad (2.160)$$

na qual a função zeta de Riemann, $\zeta(\alpha_1)$, é dada por $\zeta(\alpha_1) = \sum_{k=1}^{+\infty} k^{-\alpha_1}$, ($\alpha_1 > 1$).

Esta formulação é chamada de multimodo e o seu uso torna possível a obtenção de soluções mais realistas e condizentes com os dados experimentais. A maioria dos materiais poliméricos compõe-se de estruturas moleculares de diferentes tamanhos (polidispersos) e conseqüentemente apresentam diferentes tempos de relaxação (espectro de relaxação). Este espectro pode ser considerado desde um até um número N (suficientemente grande) de modos necessários para uma boa representação do fluido analisado.

Como dito na seção anterior, na prática, considera-se apenas N elementos de Maxwell, deste modo as equações (2.156) e (2.157), podem ser reescritas apenas como sendo:

$$\eta'(\omega) = \sum_{j=1}^N \frac{\eta_j}{1 + (\alpha_j\omega)^2}, \quad (2.161)$$

e

$$\eta''(\omega) = \sum_{j=1}^N \frac{\eta_j\alpha_j\omega}{1 + (\alpha_j\omega)^2}. \quad (2.162)$$

Como tem-se as relações $G'(\omega) = \omega\eta''(\omega)$ e $G''(\omega) = \omega\eta'(\omega)$, apresenta-se abaixo, a título de ilustração, as expressões para as funções viscoelásticas $G'(\omega)$ e $G''(\omega)$ escritas também para N elementos de Maxwell, nas duas equações que se seguem:

$$G'(\omega) = \sum_{j=1}^N \frac{\eta_j\alpha_j\omega^2}{1 + (\alpha_j\omega)^2}, \quad (2.163)$$

e

$$G''(\omega) = \sum_{j=1}^N \frac{\eta_j\omega}{1 + (\alpha_j\omega)^2}. \quad (2.164)$$

Escreve-se, finalmente, a equação (2.155) também para N elementos de Maxwell,

$$\Phi(s) = \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\alpha_k} \exp(-s/\alpha_k) = \sum_{k=1}^N A_k \exp(-s/\alpha_k), \quad (2.165)$$

na qual defini-se: $A_k = \eta_k/\alpha_k$, como sendo a k -ésima amplitude de tensão da função Φ .

2.12 Determinação de σ e $\Phi(s)$: Dois casos particulares

Aqui é apresentado dois casos particulares, muito usados na prática para se obter uma relação entre σ e $\Phi(s)$. O primeiro caso trata-se de um fluido que escoar entre duas placas paralelas por um tempo suficientemente grande, com um gradiente de velocidade para $\dot{\gamma}$ constante, de maneira que o tempo do escoamento seja bem maior que o tempo de relaxação do fluido. Assim utilizando-se das equações (2.125) e (2.133) e a hipótese $\dot{\gamma}(t') = \dot{\gamma}(t-s) = \dot{\gamma}$, em que $s = s(t') = t - t'$, obtém-se a definição de Newton para a viscosidade:

$$\sigma = \int_{-\infty}^t \Phi(t-t')\dot{\gamma}(t') dt' = \int_0^{+\infty} \Phi(s)\dot{\gamma}(t-s) ds = \dot{\gamma} \int_0^{+\infty} \Phi(s) ds = \dot{\gamma}\eta_0. \quad (2.166)$$

O segundo caso trata da determinação da função relaxação de tensão $\Phi(s) = \Phi(t-t_0)$ através da tensão σ e taxa de deformação γ_0 . Para tal é considerado um fluido elástico (memória) em repouso numa região entre duas placas paralelas para um tempo $t < t_0$. No tempo $t = t_0$ a placa superior é instantaneamente movida na direção do eixo x . Deste modo é possível determinar uma relação entre o tensor de tensões, em $t > t_0$, e a função $\Phi(s)$ para o caso viscoelástico linear $\gamma_0 \ll 1$.

Para isso assumi-se, numa primeira abordagem¹⁶, a função $\dot{\gamma}(t')$,

$$\dot{\gamma}(t') = \begin{cases} 0, & \text{se } -\infty < t' \leq t_0 - \varepsilon \\ \frac{\gamma_0}{\varepsilon}, & \text{se } t_0 - \varepsilon < t' \leq t_0 \\ 0, & \text{se } t_0 < t' \leq t, \end{cases} \quad (2.167)$$

na qual $\varepsilon > 0$ é um parâmetro temporal dado (geralmente $\varepsilon \ll 1$ s). Assim

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t \Phi(t-t')\dot{\gamma}(t') dt' = \frac{\gamma_0}{\varepsilon} \int_{t_0-\varepsilon}^{t_0} \Phi(t-t') dt'. \quad (2.168)$$

O interesse é no caso em que $\varepsilon \rightarrow 0$. Assim aplicando a regra de L'Hospital nesta última equação, tem-se a seguinte relação de proporcionalidade entre a tensão e a função $\Phi(s)$:

$$\sigma(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\gamma_0 \frac{d}{d\varepsilon} \left(\int_{t_0-\varepsilon}^{t_0} \Phi(t-t') dt' \right)}{\frac{d}{d\varepsilon}(\varepsilon)} = \gamma_0 \Phi(t-t_0). \quad (2.169)$$

¹⁶Aqui fez-se a troca de variáveis $dt = \varepsilon$, no caso do escoamento por impulso de deformação.

Numa segunda abordagem pode-se utilizar a função $\delta(t' - t_0)$, definida por

$$\delta(t' - t_0) = \begin{cases} 1, & \text{se } t' = t_0 \\ 0, & \text{se } t' \neq t_0. \end{cases} \quad (2.170)$$

Desta maneira pode-se escrever a tensão $\sigma(t)$ como sendo

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(t - t') \dot{\gamma}(t') dt' = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(t - t') \dot{\gamma}(t') \gamma_0 \delta(t' - t_0) dt'. \quad (2.171)$$

E assim usando-se a propriedade da função de delta de Dirac (que pode ser vista na próxima seção), obtém-se o mesmo resultado da equação (2.169):

$$\sigma(t) = \gamma_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(t - t') \dot{\gamma}(t') \delta(t' - t_0) dt' = \gamma_0 \Phi(t - t_0). \quad (2.172)$$

A equação (2.172) confirma o fato de que um fluido viscoelástico, em função de suas características elásticas, não é instantâneo já que a tensão responde com um atraso em relação à deformação aplicada. Além disso, ela permite que se obtenha experimentalmente a função relaxação de tensão $\Phi(t - t_0)$ de um determinado fluido complexo, bastando para isso que se aplique uma deformação ao material em um intervalo de tempo pequeno e se avalie, em seguida, a variação da tensão $\sigma(t)$.

2.13 Modelo de Jeffrey

Finalizando este capítulo, tem-se o modelo de Jeffrey [8], aqui considera-se uma relação linear entre $\boldsymbol{\sigma}$ e \mathbf{D} , dada pela equação:

$$\boldsymbol{\sigma} = -\alpha_1 \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + 2\eta_0 \left(\mathbf{D} + v \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right). \quad (2.173)$$

Note que α_1 e v são constantes de tempo, a saber, são os tempos de relaxação e retardação, respectivamente. Considerando-se que para $t = -\infty$ as funções $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{D} e $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ são finitas, ao integrarmos a equação (2.173), obtém-se:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_{-\infty}^t \left[\frac{2\eta_0}{\alpha_1} \left(1 - \frac{v}{\alpha_1} \right) \exp(-(t - t')/\alpha_1) \mathbf{D}(t') \right] dt' + 2\eta_0 \frac{v}{\alpha_1} \mathbf{D}(t). \quad (2.174)$$

É oportuno observar que deve-se ter $v < \alpha_1$, uma vez que se quer ter $\sigma > 0$. Outro fato é que, se $v = 0$, então tem-se novamente o modelo de Maxwell dado pela equação (2.143).

É comum encontrar na literatura [8],[4] a equação (2.174) de maneira que todos os termos fiquem na integral, para realizar esta tarefa, usa-se as propriedades da “função” delta de Dirac, que é definida por:

$$\delta(t - t') = \begin{cases} 0, & \text{se } t \neq t' \\ \infty, & \text{se } t = t' \end{cases} \quad (2.175)$$

Utiliza-se a importante propriedade desta “função” que afirma que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\delta(t - t') dt' = f(t), \quad (2.176)$$

e conseqüentemente pode-se escrever a expressão:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\delta(t - t') dt' = 2 \int_{-\infty}^t f(t)\delta(t - t') dt' = f(t). \quad (2.177)$$

Escrevendo-se a expressão $2\eta_0 \frac{v}{\alpha_1} \mathbf{D}(t)$ da forma

$$2\eta_0 \frac{v}{\alpha_1} \mathbf{D}(t) = 2 \int_{-\infty}^t 2\eta_0 \frac{v}{\alpha_1} \delta(t - t') \mathbf{D}(t') dt' = \int_{-\infty}^t 4\eta_0 \frac{v}{\alpha_1} \delta(t - t') \mathbf{D}(t') dt', \quad (2.178)$$

tem-se finalmente que

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_{-\infty}^t \left[\frac{2\eta_0}{\alpha_1} \left(1 - \frac{v}{\alpha_1} \right) \exp \left[- (t - t') / \alpha_1 \right] + 4\eta_0 \frac{v}{\alpha_1} \delta(t - t') \right] \mathbf{D}(t') dt'. \quad (2.179)$$

Ao observar as equações (2.143) e (2.179) vê-se que as mesmas diferem pelo termo entre colchetes, i.e., apenas pelos termos referentes aos módulos de relaxação.

Vale ainda ressaltar que outros modelos lineares e não-lineares surgem na literatura [8],[9],[45] e para este fim é preciso apenas adicionar mais derivadas temporais nas equações constitutivas, ou seja, partindo da equação constitutiva geral da viscoelasticidade linear (princípio da super-posição) dada pela equação (2.120),

$$\left(1 + \sum_{n=1}^{+\infty} a_n \frac{\partial^n}{\partial t^n} \right) \sigma_{ij} = 2\eta_0 \left(1 + \sum_{n=1}^{+\infty} b_n \frac{\partial^n}{\partial t^n} \right) D_{ij}. \quad (2.180)$$

CAPÍTULO 3

UM POUCO DE REOLOGIA E ALGUNS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Este capítulo servirá para apresentar uma breve introdução [51] reometria. Na oportunidade se verá as metodologias experimentais utilizadas para a obtenção das funções materiais, como: viscosidade aparente, módulos viscoelásticos e a função relaxação de tensões, que servem para caracterizar o comportamento reológico da suspensão polimérica aquosa da Poliacrilamida aniônica (PAMA) com fração volumétrica de $\phi = 400 \text{ ppm}$.

A amostra de PAMA foi submetida aos escoamentos por:

1. Cisalhamento Simples;
2. Cisalhamento oscilatório de pequena deformação;
3. Passo de deformação aplicada.

Todos os experimentos foram realizados a uma temperatura constante de 20°C .

Estas medidas foram obtidas com a utilização do Reômetro. Por isso dedica-se abaixo uma seção que descreve as principais características deste aparelho.

3.1 Reômetro

O reômetro da Anton Paar do modelo Physica MCR 301, figura (3.1), está instalado sobre uma mesa robusta e isolada de vibrações, no laboratório de reologia do grupo do Vortex-UnB. Permite estudar tanto fluidos newtonianos como não-newtonianos com ou sem influência de campo magnético, em cisalhamento simples (permanente) e oscilatório (transiente). Uma das grandes vantagens deste reômetro é a necessidade de pequenas quantidades de amostra (máxima de 2 ml). Esta característica promove a economia de fluidos de elevado custo como também fluidos biológicos, permitindo ensaiar amostras muitas vezes menores do que 1 ml .



Figura 3.1: Reômetro Anton Paar-Modelo Physica MCR 301.

Passamos a detalhar um pouco mais sobre seu funcionamento. O reômetro é formado por placa plana e disco rotativo, ou reômetro de placas paralelas. A figura (3.2) mostra um esquema de seu funcionamento. O cisalhamento da lâmina fluida que está entre o disco e a placa, no espaço δ , ocorre em regime permanente ou oscilatório e é causado pela rotação com velocidade angular Ω do disco. Este possui raio R e seu plano é perpendicular à direção z , sendo esta a direção da aceleração gravitacional local.

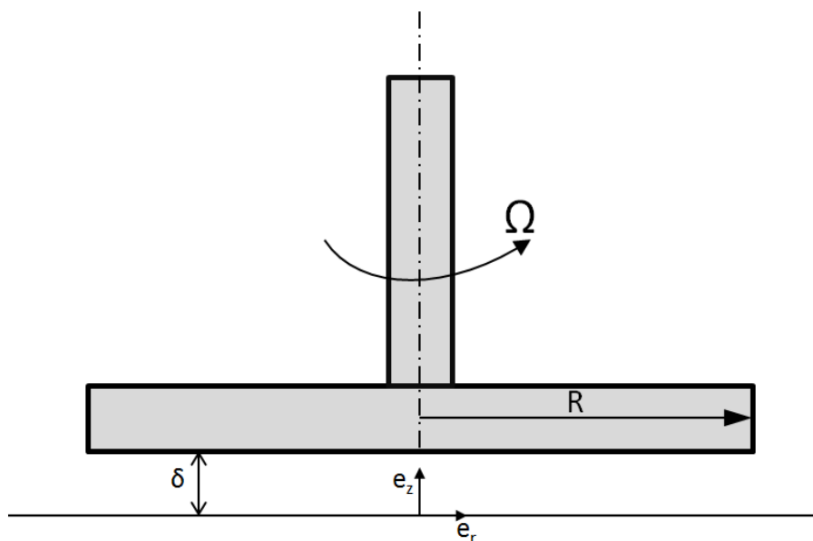


Figura 3.2: Esquema de funcionamento do reômetro de placas paralelas. O disco de raio R gira sobre a placa. O fluido reside no espaçamento (“gap”) de comprimento δ entre o disco e a placa. A direção θ é perpendicular ao plano da página. Fonte: [53].

O reômetro é alimentado por ar-comprimado gerado pelo compressor da Shulz (modelo MSV6), do tipo médico-odontológico. O ar-comprimado antes de chegar ao reômetro é limpo e desumidificado através de filtros e desumidificadores, figura (3.3). O sistema de ar comprimido possibilita um torque de operação no intervalo de $0,1 \mu Nm$ a $200 m Nm$. A resolução do torque do reômetro é de $0,2 \mu Nm$. O torque é uma quantidade mecânica a ser controlada de forma que esteja sempre dentro do intervalo indicado pelo fabricante. Dependendo da viscosidade do fluido a ser testado, a taxa de cisalhamento pode chegar a valores em torno de $5000 s^{-1}$, superando os viscosímetros padrões. É de se destacar que o sistema de ar-comprimado permite o deslocamento automático do braço do reômetro com uma rapidez e precisão considerável. O espaçamento δ , entre o disco e o prato onde se localiza a amostra pode ser menor do que $0,5 mm$ [51],[23].

A temperatura da amostra é controlada por um sistema Peltier acoplado ao disco fixo, o qual funciona com base no efeito Peltier, caracterizado pela manutenção de uma diferença de temperatura na união de dois condutores (ou semicondutores) de materiais distintos em um circuito fechado, quando este é percorrido por uma corrente elétrica. Este dispositivo permite um controle ativo e preciso da temperatura da amostra, podendo variá-la de -40 a $200^\circ C$. Para fins de minimização de erros experimentais, o sistema Peltier necessita de uma



Figura 3.3: Sistemas de filtros de óleo (os dois filtros da esquerda), desumidificador (braço branco horizontal central) e filtro de partículas (filtro mais a direita).

referência externa de temperatura, a qual é fornecida por um banho térmico do fabricante Lauda, figura (3.4), (modelo Ecoline RE104) acoplado ao reômetro, o qual é regulado para manter a temperatura constante em 20°C .

O reômetro é conectado a um microcomputador, através do qual é operado com o auxílio do software Rheoplus (Anton Paar), em que são definidos todas as condições de realização do experimento, como a taxa da cisalhamento, a frequência de oscilação, a temperatura do experimento (no caso de ensaios isotérmicos) ou o perfil taxa de aquecimento, dentre parâmetros necessários à realização de diferentes experimentos. Além disso, o software apresenta, em tempo real, os dados coletados dispostos sob a forma de gráficos e tabelas. Diversos modelos reológicos (dos quais alguns podem ser visto na seção (2.5)) ad-hoc estão disponíveis e automatizados em sua base de dados, o que possibilita um pós-processamento preliminar e, com isso, uma verificação à priori da adequação das medidas a modelos teóricos.



Figura 3.4: Banho térmico Lauda com controle digital de temperatura.

3.1.1 Cálculo da Viscosidade em Função do Torque.

Inicia-se o problema descrevendo matematicamente o campo de velocidade geral em coordenadas cilíndricas¹, na equação abaixo:

$$\mathbf{u}(r, \theta, z) = (u_r(r, \theta, z); u_\theta(r, \theta, z); u_z(r, \theta, z)). \quad (3.1)$$

Ressalta-se que será tratada apenas a componente $u_\theta(r, z)$ neste caso, pois se trata do plano (rz) do escoamento.

Para que a velocidade seja unidirecional, tenha apenas componente na direção θ , é necessário que a condição:

$$Re \left(\frac{\delta}{R} \right) \ll 1, \quad (3.2)$$

seja satisfeita, em que $Re = \rho\Omega R^2/\mu$ é o número de Reynolds do escoamento. Nos experimentos tem-se em geral que $\delta \approx 0.1 \text{ mm}$ e que $R \approx 10 \text{ mm}$ deste modo $\delta/R \approx 10^{-2}$, logo a condição de unidirecionalidade é sempre garantida mesmo para altos valores de Ω .

¹Mais detalhes no capítulo 7.

Do apêndice (II) pode-se concluir que as equações do movimento, na condição de uni-direcionalidade, são tais que:

$$-\frac{\rho u_\theta^2}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r}, \quad (3.3)$$

$$0 = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2}, \quad (3.4)$$

e

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g. \quad (3.5)$$

Onde ρ é a massa específica do fluido, p é o campo de pressão, g é o módulo da aceleração da gravidade e μ é a viscosidade do fluido.

Integrando a equação (3.3) teremos

$$p = \int \rho \frac{u_\theta^2(r, z)}{r} dr + h(\theta, z), \quad (3.6)$$

e substituindo na equação (3.4), obteremos simplismente:

$$\frac{\partial h}{\partial \theta} = r\mu \left(\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} \right). \quad (3.7)$$

Mas devido a simetria do escoamento h deve depender apenas de z , o que nos leva a seguinte equação:

$$\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} = 0. \quad (3.8)$$

As condições de contorno naturais para este problema são tais que podem ser resumidas por: $u_\theta(r, 0) = 0$ e $u_\theta(r, \delta) = \Omega r$, devido a condição de não deslizamento. Dessa maneira o perfil de velocidade $u_\theta(r, z)$ será então dado por:

$$u_\theta(r, z) = \frac{\Omega r z}{\delta}. \quad (3.9)$$

Ainda de acordo com o apêndice (II), temos que a tensão de cisalhamento no plano perpendicular ao vetor \mathbf{e}_z na direção θ , é dada pela equação:

$$\sigma_{z\theta}(r, z) = \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right). \quad (3.10)$$

Substituindo a equação (3.9) na equação (3.10) teremos a expressão para a tensão de cisalhamento na superfície do disco rotativo, dada pela equação:

$$\sigma_{z\theta}(r, \delta) = \mu \frac{\Omega r}{\delta}. \quad (3.11)$$

A força exercida no disco é dada pelo produto da tensão de cisalhamento que ali atua e pela área do disco, ou seja:

$$dF_\theta = \sigma_{z\theta}(r, \delta) dA = \mu \frac{\Omega r}{\delta} 2\pi r dr. \quad (3.12)$$

Como a força varia ao longo de r , para se obter o torque \mathcal{T} é preciso fazer a integração ao longo do raio, assim

$$\mathcal{T} = \int_0^R r dF_\theta. \quad (3.13)$$

E substituindo a equação (3.12) na equação (3.13), resolvendo a integral, obtem-se finalmente que o torque \mathcal{T} é dado pela relação:

$$\mathcal{T} = \frac{\mu\pi\Omega R^4}{2\delta} \iff \mu = \frac{2\delta\mathcal{T}}{\pi\Omega R^4} = \frac{2\mathcal{T}}{\dot{\gamma}_R\pi R^3}, \quad (3.14)$$

em que $\dot{\gamma}_R = \Omega r/\delta$ é a taxa de cisalhamento² avaliada em $r = R$.

A expressão dada pela equação (3.14) indica como a viscosidade μ de um fluido pode ser obtida pela medição do torque \mathcal{T} atuando em um disco. Apesar de ter sido desenvolvida para fluido newtoniano, é possível medir a viscosidade aparente de qualquer fluido utilizando um instrumento que funcione de acordo com esta configuração [19]. Uma vantagem importante que o escoamento entre disco de placa plana possui é a possibilidade de controle do tamanho do espaçamento δ , sendo mais uma maneira de se garantir a unidirecionalidade do escoamento e uma taxa de cisalhamento constante devido à linearidade do perfil de velocidade na direção z [53].

Sabendo-se que o torque está relacionado diretamente com a viscosidade do fluido e com a taxa de cisalhamento, equação (3.14), conclui-se que para fluidos com alta viscosidade a taxa de cisalhamento tem que ser baixa para que o torque não seja tão elevado a ponto de superar os limites do reômetro. Assim o espaçamento δ tem que ser grande para manter a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ possível de ensaiar nas condições estabelecidas. Conhecendo-se a dimensão do espaçamento entre dois discos e o diâmetro do disco rotativo pode-se calcular o volume de líquido da amostra. Aconselha-se que o volume de líquido colocado sobre o disco do reômetro seja um pouco acima do estimado, para que o disco rotativo seja completamente preenchido pelo fluido.

²É possível integrar a equação (3.12) mesmo que μ dependa de $\dot{\gamma}$ porque avalia-se o $\dot{\gamma}$ em R , que corresponde ao valor máximo já que no reômetro de disco rotativo o $\dot{\gamma}$ aumenta linearmente com r .

A questão do controle do espaçamento dos discos é importante uma vez que existe um valor ótimo [20] para este parâmetro de forma que a medição da viscosidade permaneça inalterada para uma determinada taxa de cisalhamento. Nos ensaios com a suspensão polimérica a dimensão das gotas tem que ser muito menor que o espaçamento dos discos para que se garanta um meio contínuo e evite uma condição de deslizamento entre a gota e os contornos sólidos do escoamento. Afinal, a condição de contorno de deslizamento é uma hipótese para um fluido contínuo ou um sistema complexo fluido que possa ser aproximado por um meio homogêneo equivalente.

3.2 Características de uma Suspensão Polimérica.

Nesta seção serão descritas algumas propriedades de uma suspensão polimérica [51], [23]. A suspensão em questão trata da poliacrilamida aniônica PAMA. O polímero utilizado neste trabalho foi o Art Floc/SCP 1530 (Art-Aratrop), que é uma suspensão aquosa de poliacrilamida aniônica (PAMA) com concentração volumétrica de $\phi = 34\%$. A partir desta suspensão base produziram-se, por diluição em água destilada, as demais amostras [51].

O comportamento reológico de líquidos poliméricos é primariamente dependente de sua composição química, sabe-se que estas suspensões poliméricas são formadas por macromoléculas, as quais, por sua vez, são compostas por muitas unidades químicas pequenas, geralmente denominadas unidades repetidoras ou monômeros. As cadeias poliméricas podem ser de três tipos:

- Lineares - nas quais cada unidade estrutural é conectada precisamente a outras duas unidades, figura (3.5)-(a);
- Ramificadas - nas quais a maioria das unidades estruturais estão ligadas somente a outras duas, como as lineares, porém algumas conetam-se a três ou mais unidades adjacentes, figura (3.5)-(b);
- Em rede - nas quais todas as unidades repetidoras estão interconectadas, resultando em uma estrutura tridimensional com ligações cruzadas.

Fluidos poliméricos são fluidos viscoelásticos, significando que estes apresentam tanto

propriedades dissipativas (líquidos) quanto de sólidos (elásticas). Por elasticidade entende-se a capacidade de um material de retornar a sua forma única original, o que não se verifica em fluidos newtonianos, que é caracterizado como um material que assumirá a forma de qualquer recipiente em que estiver contido, não apresentando, portanto, uma configuração inicial única [51]. A elasticidade introduz no fluido efeitos não lineares e dependentes do tempo, dando origem aos fluidos com memória, também denominados fluidos não-instantâneos, ou seja, aqueles capazes de “lembrar”, ao menos parcialmente, de sua configuração inicial.

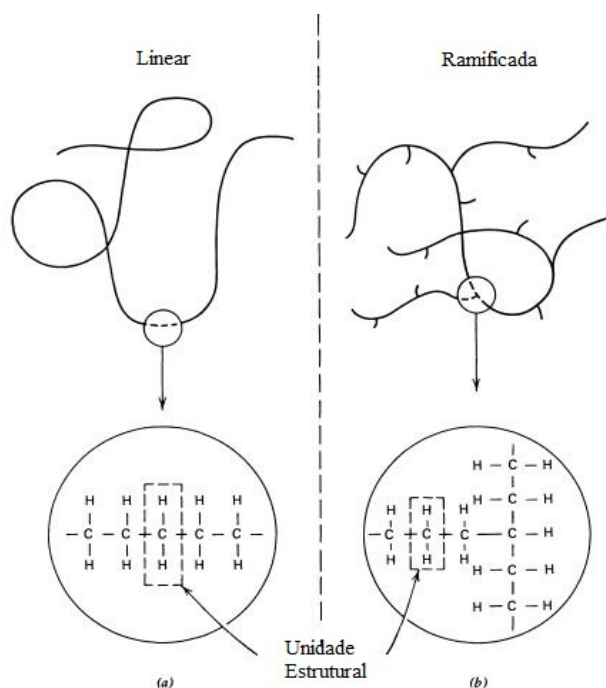


Figura 3.5: Representação esquemática de macromoléculas lineares e ramificadas. Fonte: Bird et al, 1987 [8].

Um parâmetro de grande influência nas propriedades viscoelásticas e, em função disso, no comportamento reológico de líquidos poliméricos é a sua massa molecular, sendo esta definida como o produto da massa molecular de cada unidade estrutural pelo número destas presentes na cadeia polimérica. De acordo com [8], polímeros sintéticos apresentam massa molecular entre 10^4 e 10^6 g/mol. Com base na massa molecular de seus constituintes, os líquidos poliméricos são classificados em monodispersos, se todas as suas cadeias poliméricas apresentarem a mesma massa molecular e polidispersos, se conter macromoléculas de diferentes massas moleculares.

A representação estrutural das cadeias poliméricas não informa sobre a gama de configurações que as macromoléculas podem assumir devido a mudanças em sua configuração. Na realidade, muitos polímeros são capazes de assumir um grande número de configurações diferentes por rotações ao redor de suas ligações químicas. Ademais, as moléculas estão sempre mudando de configuração, em função de movimentos induzidos por variações térmicas. Estas mudanças podem ser localizadas ou envolverem grande parte da macromolécula e associada às taxas de mudanças das referidas configurações, estão as constantes temporais do fluido, ou seja, existe um espectro de tempos de relaxação em que cada tempo de relaxação está ligado a um mecanismo de variação conformacional da cadeia polimérica [51].

3.2.1 Solução aquosa de poli(acrilamida) aniônica-PAMA

A PAMA é um polímero de alta massa molecular, em torno de 10^6 g/mol. Na figura (3.6) apresentamos seu monômero e unidade estrutural.



Figura 3.6: Monômero e unidade estrutural da PAMA. Fonte: [8].

As soluções aquosas de PAMA apresentam diversas aplicações das quais as principais são: floculação de particulados metálicos em sistemas de tratamento de água, fabricação de gel para eletroforese (substrato utilizado em exames de DNA) e como aditivo na redução de arrasto em escoamentos turbulentos em dutos [18]. Dado que a PAMA é um polímero de alto peso molecular, é necessário que se compreenda como este fator afeta as propriedades reológicas do fluido base, quando em suspensão. Para tanto, deve-se primeiramente, discutir-se a diferença entre as características de soluções diluídas e concentradas.

Soluções poliméricas diluídas ($\phi \ll 1$) são aquelas em que suas macromoléculas estão de tal forma dispostas no fluido base que não apresentam contato físico entre sí. Neste caso, ela pode ser modelada como um conjunto formado por dois cordões, representando as forças de arrasto, ligadas entre si por uma mola hookeana, simulando as forças elásticas,

como visto na seção (2.2).

Além disso, é válido salientar que para soluções diluídas pode-se considerar que as macromoléculas interagem somente de forma hidrodinâmica, alterando o campo de velocidades das macromoléculas adjacentes, apresentando somente interações de pares [28]. A inércia adicionada ao sistema pelas macromoléculas introduz, neste, uma memória, caracterizada por um tempo de relaxação, que é uma medida do quão rapidamente o sistema retorna à sua conformação inicial, dado a aplicação externa de uma tensão. Como veremos na seção (4.2) adiante, de acordo Gennes [28], para um sistema do tipo haltere, o tempo de relaxação τ é proporcional à massa molecular do polímero elevada a $3/2$, como se verá no próximo capítulo.

Suspensões concentradas, por outro lado, dependendo da fração volumétrica de soluto, apresentam interações muito complexas entre as cadeias poliméricas, desde interações hidrodinâmicas de muitos corpos até interações de contato, como entrelaçamento. Neste caso, diz-se que o sistema não apresenta somente um, mas sim um espectro de tempos de relaxação, os quais derivam diretamente do tipo de interação entre as cadeias, que caracterizam diferentes modos dinâmicos do fluido [28].

No presente trabalho trabalha-se somente com suspensões diluídas. Na figura (3.7) mostra-se duas soluções de PAMA para duas frações volumétricas. Note que para $\phi = 400 \text{ ppm}$ tem-se uma coloração transparente semelhante a da água (fluido base), bem diferente do caso (b) em que $\phi = 5000 \text{ ppm}$ e observa-se uma coloração mais branca.

3.3 Resultados Experimentais

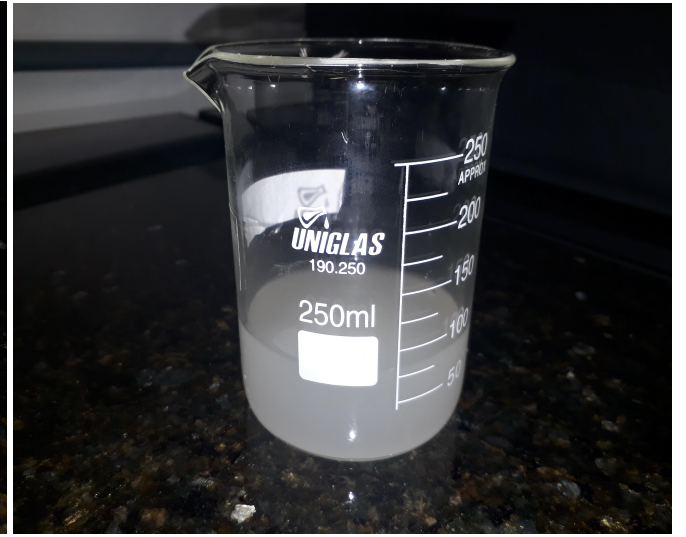
Apresenta-se nesta seção alguns resultados experimentais de nosso interesse, no que se diz respeito ao objeto de estudos da presente tese.

Como se verá na seção (4.2.3) mais adiante, o interesse é em trabalhar, inicialmente, com a viscosidade adimensional em função da fração volumétrica ϕ , segundo a expansão virial de $\mathcal{O}(\phi^2)$, dado pela equação (3.15), conforme [7]:

$$\frac{\mu_s(\phi)}{\mu_w} = 1 + c_1\phi + c_2\phi^2, \quad (3.15)$$



(a) $\phi = 400 \text{ ppm}$



(b) $\phi = 5000 \text{ ppm}$

Figura 3.7: Aspectos macroscópicos de duas suspensões de poliacrilamida aniônica a fração volumétrica de: (a) $\phi = 400 \text{ ppm}$ e (b) $\phi = 5000 \text{ ppm}$.

com c_1 e c_2 parâmetros de ajuste dos dados experimentais. Aqui $\mu_s(\phi)^3$ denota a viscosidade da suspensão polimérica e μ_w denota a viscosidade do fluido base, que no caso é a água destilada a 20°C . A esta temperatura a mesma possui viscosidade constante de $\mu_w = 1.002 \text{ cP} = 0.001002 \text{ Pa s}$.

Apresenta-se na tabela (3.1) os dados experimentais da viscosidade adimensional da PAMA obtidos para várias frações volumétricas ϕ , conforme gentilmente fornecido por [51].

³Assumi-se inicialmente que μ_s dependa apenas da fração volumétrica ϕ . Na verdade ela pode depender também da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$, e isso ocorre quando a suspensão é mais concentrada.

Tabela 3.1: Valores experimentais da viscosidade adimensional $\mu_s(\phi)/\mu_w$ e seus respectivos valores de fração volumétrica ϕ . Apresentamos também o erro experimental.

| ϕ [ppm] | μ_s/μ_w | Erro |
|--------------|---------------|-----------|
| 0.0 | 1.002 | 0.0 |
| 100 | 17.863 | 3.489 |
| 200 | 31.185 | 6.411 |
| 300 | 46.909 | 6.472 |
| 500 | 115.000 | 41.470 |
| 1000 | 137.958 | 41.470 |
| 5000 | 6080.410 | 801.470 |
| 10000 | 18200.000 | 1820.470 |
| 50000 | 415935.000 | 41593.470 |

Os dados experimentais foram coletados através da aplicação de um cisalhamento permanente, em que usou-se a abordagem ponto-a-ponto que é aplicada da seguinte forma: para taxas de cisalhamento $\dot{\gamma}$ fixas e pré-definidas, obtém-se as curvas de viscosidade em função do tempo, realizando, para cada $\dot{\gamma}$ no mínimo cinco medições. Em seguida, através da média temporal, define-se a viscosidade para cada medição e, calculando-se uma média aritmética e um desvio-padrão dos cinco valores obtidos, determina-se o valor da viscosidade aparente para a taxa de cisalhamento fixada e o erro aleatório a ela associado. Ou seja, este processo deve ser realizado para todas as taxas de cisalhamento pré-definidas, a fim de se obter a curva $\mu(\dot{\gamma}) \times \dot{\gamma}$ para um dado fluido que se deseja analisar [51], [23].

A estratégia descrita acima é muito dependente da escala de tempo característica do material e, portanto, deve-se esperar, no caso de fluidos que apresentam memória, que estes se adaptem à taxa de cisalhamento aplicada, o que é verificado experimentalmente a partir do momento em que a curva de viscosidade em função do tempo passa a ser constante, mostrando que os transientes materiais do fluido foram superados e que este encontra-se em regime permanente [51].

Como era de se esperar, na tabela (3.1), o aumento da fração volumétrica ϕ implica num aumento considerável da viscosidade da suspensão polimérica, porém, nota-se na referida

tabela que a medida que a fração volumétrica aumenta temos também um aumento considerável no erro obtido na medição da relação $\mu_s(\phi)/\mu_w$. Note ainda que, para $\phi = 10000 \text{ ppm}$ tem-se que a viscosidade da suspensão é em torno de 1800 vezes maior que a viscosidade da água. E para $\phi = 50000 \text{ ppm}$ tem-se uma viscosidade μ_s igual a, aproximadamente, 41600 vezes a viscosidade da água.

Na figura (3.8) tem-se, novamente, os dados da tabela (3.1) bem como dos ajustes linear e parabólico feitos a partir destes dados experimentais, de acordo com a equação (3.15). Como o interesse é trabalhar apenas no regime diluído, i.e., $\phi \ll 1$, então consideraremos, por enquanto⁴, a expansão linear proposta por Einstein [25], da forma:

$$\mu_s(\phi) = \mu_w(1 + c\phi). \quad (3.16)$$

3.3.1 Variação da Viscosidade de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica $\phi = 400 \text{ ppm}$.

A fim de se calcular a viscosidade de uma suspensão de PAMA à fração volumétrica $\phi = 400 \text{ ppm}$, foi aplicado um cisalhamento simples em que usou-se a abordagem contínua para o tratamento dos dados experimentais coletados. Esta nova abordagem, por sua vez processa-se de uma maneira substancialmente mais simples do que a abordagem ponto-a-ponto descrita na seção anterior. Passamos a descrevê-la: define-se, através do programa Rheoplus, uma rampa de taxa de cisalhamento, indicando seu valor inicial e final, além do número de pontos experimentais em que se deseja obter o valor da viscosidade aparente neste intervalo.

Outro fator importante que deve ser informado ao programa é o perfil desejado de variação da taxa de cisalhamento, podendo ser linear ou logarítmico. Portanto, ao final deste procedimento, obtém-se diretamente a curva correspondente ao comportamento da viscosidade aparente em função da taxa de cisalhamento. Repetindo-se este procedimento no mínimo 5 vezes e calculando uma média e um desvio padrão sobre as realizações, obtém-se a caracterização desejada. No entanto, este procedimento não garante, a priori, que o tempo para que o regime permanente seja atingido, esteja sendo respeitado pelo equipamento.

⁴Em seguida trabalharemos com o modelo de Cross

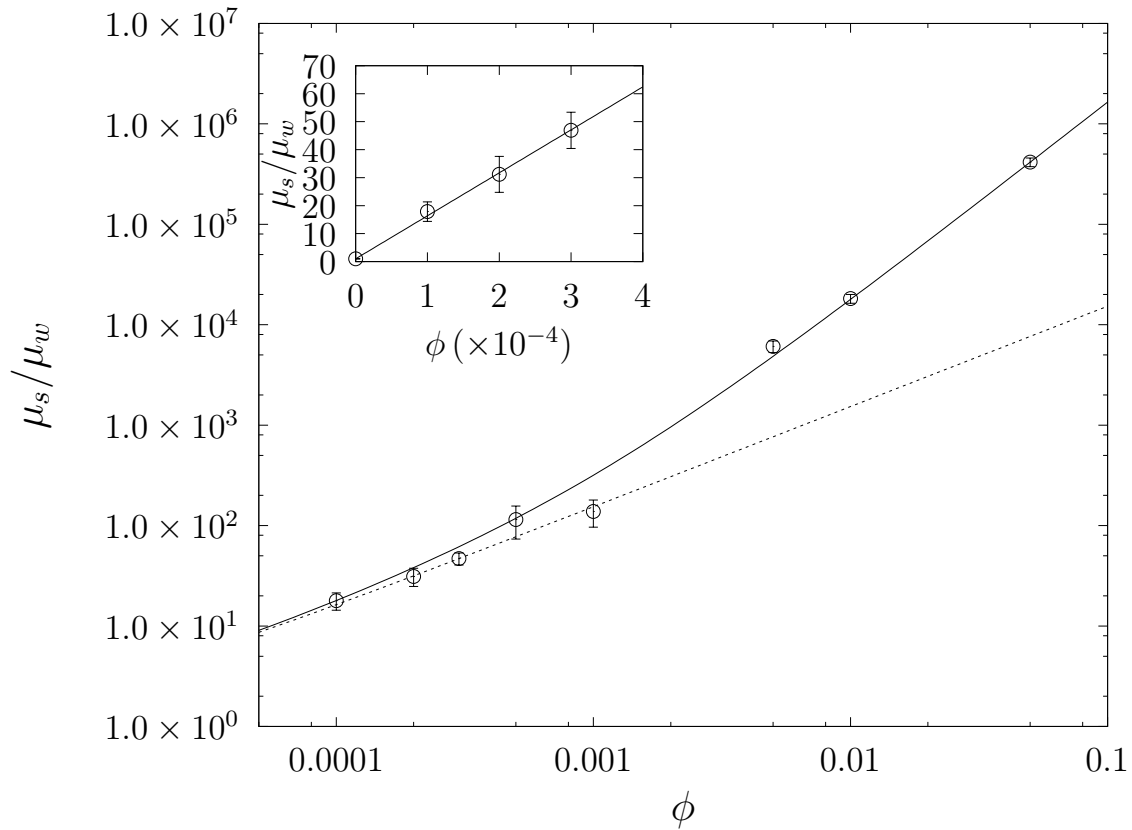


Figura 3.8: Variação da viscosidade adimensional $\mu_s(\phi)/\mu_w$ em função da fração volumétrica ϕ da PAMA a 20°C . O ajuste linear (linha pontilhada) é o proposto pela teoria de Einstein e é dado por: $\mu_s(\phi) = \mu_w(1 + c\phi)$, com $c = c_1 = 1.53 \times 10^5$. E a curva parabólica (linha contínua), trata do ajuste feito através do modelo de Batchelor-Green [7]: $\mu_s(\phi) = \mu_w(1 + c_1\phi + c_2\phi^2)$, com $c_2 = 1.63 \times 10^8$. No encarte temos em detalhe o ajuste linear para ϕ até 300 ppm. Fonte: [51].

Uma alternativa para resolver tal empecilho é a utilização da função “No time setting”, a qual informa ao instrumento que o valor do passo de tempo para a coleta de dados deve ser adaptativo, implicando que este aumente continuamente no sentido das menores taxas de cisalhamento, dado que estas implicam em um maior transiente material. Por ser um processo mais breve, dá-se prioridade à abordagem contínua, no entanto, tratando-se de fluidos complexos pouco viscosos, caso de suspensões poliméricas diluídas, a abordagem ponto-a-ponto mostra-se mais efetiva na obtenção de dados em regimes de pequenas taxas de cisalhamento, já que o controle do torque mínimo é realizado com maior precisão.

Os ensaios experimentais de cisalhamento permanente isotérmico foram realizados para a amostra da suspensão de poliacrilamida aniônica (PAMA) com $\phi = 400 \text{ ppm}$, de acordo com o procedimento experimental discutido acima. Estes experimentos tiveram por objetivo determinar a dependência da viscosidade aparente em função da taxa de cisalhamento. O resultado desta etapa pode ser visto no gráfico da figura (3.9).

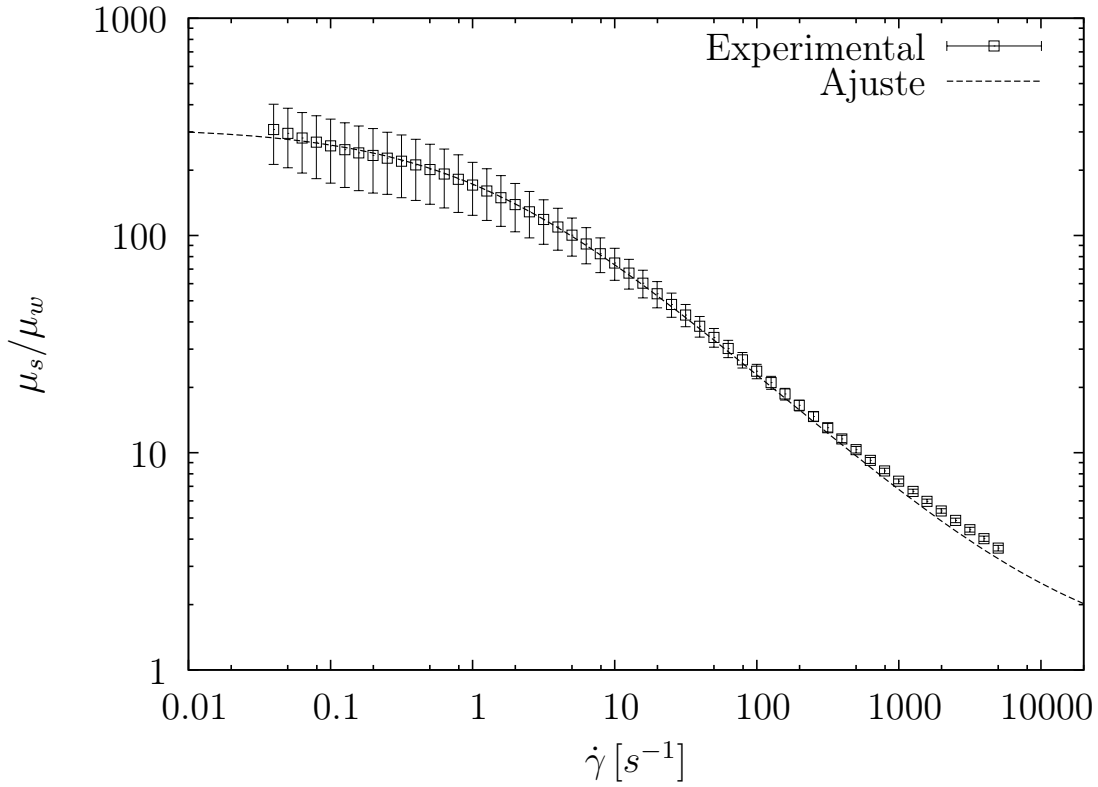


Figura 3.9: Quadrados abertos denotam a viscosidade adimensional μ_s/μ_w de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica $\phi = 400 \text{ ppm}$ em função da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$. A linha pontilhada representa o ajuste feito através do modelo de Cross (seção (2.5)) adimensional dada por $\frac{\mu_s(\dot{\gamma})}{\mu_w} = \frac{1}{\mu_w} \left(\frac{\mu_0 + \mu_\infty (k\dot{\gamma})^m}{1 + (k\dot{\gamma})^m} \right)$, com $\mu_0 = 315.1 \text{ cP}$, $\mu_\infty = 1.073 \text{ cP}$, $k = 0.735114$ e $m = 0.604323$. Na verdade para $\dot{\gamma} = 0.04 \text{ s}^{-1}$ obteve $\mu_s/\mu_w = 307.26$, sendo assim extrapolou-se o valor de μ_0 para $\mu_0 = 315.1 \text{ cP}$ afim de se obter um melhor ajuste pelo modelo de Cross.

A análise do gráfico da figura (3.9) nos mostra um comportamento pseudoplástico, i.e., sua viscosidade decresceu em função de um aumento da taxa de cisalhamento aplicada. No entanto, para faixas de $\dot{\gamma}$ pequeno, ou seja de tempos característicos do experimento grandes, a estrutura polimérica do fluido não reage ao escoamento, permanecendo em um estado de equilíbrio randômico, dando origem ao platô inicial de viscosidade obtido no gráfico da referida figura, este patamar é denominado genericamente de platô newtoniano, dado que representa uma região em que a viscosidade é constante em relação à taxa de cisalhamento. A esta propriedade, representada por μ_0 , dá-se o nome de viscosidade em cisalhamento zero.

Aumentando $\dot{\gamma}$ o tempo característico do escoamento diminui e quando este torna-se aproximadamente da mesma ordem de grandeza do tempo característico do fluido a estrutura polimérica deste passa a interagir intensamente com o escoamento, sofrendo um forte estiramento, resultante da tentativa do escoamento em alinhar as macromoléculas com as linhas de corrente tornando o fluido anisotrópico, ao que está associado à redução da viscosidade aparente observada para taxas de cisalhamento moderadas e altas. No entanto as cadeias poliméricas apresentam elasticidade e competem com o escoamento, tentando restaurar sua estrutura de equilíbrio, a este mecanismo está associada a memória do fluido, pois, retirada a taxa de cisalhamento as macromoléculas relaxam e o fluido retorna a sua condição de viscosidade original desde que a taxa de cisalhamento não tenha sido excessiva a ponto de causar a degradação das cadeias poliméricas.

Destaca-se ainda a importante relação de Cross, apresentada na seção (2.5), para o ajuste da viscosidade feita no gráfico (3.9).

$$\frac{\mu_0 - \mu_s}{\mu_s - \mu_\infty} = [k\dot{\gamma}]^m, \quad (3.17)$$

sendo μ_s a viscosidade da suspensão polimérica, $\mu_0 = \mu_{\dot{\gamma} \rightarrow 0}$ e $\mu_\infty = \mu_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty}$.

Aqui e na figura (3.9) é apresentado este modelo em função da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$, porém pode-se usar a definição do número de Deborah (adimensional) dada por: $De = \tau_p \dot{\gamma}$, e assim escrever a equação (3.17) em função deste número, isto é, pode-se adimensionalizar a equação (3.17) partindo deste número. Para isto use o fator de escala da viscosidade como sendo a viscosidade da água μ_w e o tempo de relaxação principal τ_p da macromolécula.

Deste modo, tem-se, de maneira geral, o seguinte modelo de Cross adimensional dado por:

$$\tilde{\mu}_s(De) = \frac{\mu_s}{\mu_w} = \frac{\tilde{\mu}_0 + \tilde{\mu}_\infty (KDe)^m}{1 + (KDe)^m}, \quad (3.18)$$

em que: $\tilde{\mu}_0 = \mu_0/\mu_w$, $\tilde{\mu}_\infty = \mu_\infty/\mu_w$, $K = k/\tau_p$ e $De = \tau_p\dot{\gamma}$. Aqui ressalta-se o fato de que a equação (3.18) é agora dependente de De , diferentemente da forma de se considerar a viscosidade adimensional dada pelo modelo linear de Einstein (equação (3.16)). Os termos $\tilde{\mu}_0$ e $\tilde{\mu}_\infty$ variam em função de ϕ e De , mas no presente trabalho a variação em ϕ não será explorada.

3.3.2 Determinação das propriedades viscoelásticas da PAMA com a utilização de um cisalhamento oscilatório.

O ensaio experimental de cisalhamento oscilatório de pequena deformação isotérmico é muito utilizado em reologia experimental, pois permite que se determine a resposta viscoelástica dos mais diversos fluidos complexos, caracterizado por seus módulos viscoelásticos [51].

Esta técnica baseia-se na exposição do fluido a uma vasta gama de tempos característicos de escoamento, o que é feito através da variação contínua da frequência de aplicação do cisalhamento. Logo, capturam-se três comportamentos do fluido em função da frequência: quando esta é baixa, o tempo característico do escoamento torna-se alto e portanto, verifica-se que a microestrutura deste não sofre influência do escoamento, permanecendo inalterada, o que, no caso de fluidos poliméricos caracteriza um platô de viscosidade constante. Conforme a frequência aumenta, os tempos característicos do escoamento e do fluido passam a ser da mesma escala e, portanto, as macromoléculas passam a interagir com o escoamento e as propriedades elásticas do fluido começam a apresentar uma crescente influência sobre o escoamento, assim como as propriedades dissipativas passam a diminuir. Para altas frequências, observa-se uma predominância das propriedades elásticas e, portanto um comportamento mais sólido do material.

Uma etapa importante deste experimento é a determinação da deformação angular γ , que deve ser usada para garantir que o ensaio se dará em regime de viscoelasticidade linear. Isto é feito fixando-se a maior frequência que se pretende aplicar ao fluido a ser

testado, realizando, em seguida, uma varredura de deformação angular (strain), variando esta grandeza de 0,001% a 1%. Busca-se, então, a região em que o módulo elástico G' se mostra invariante à deformação angular. Nesta região, seleciona-se um valor de deformação angular a ser usado nos experimentos de varredura de frequência.

Na etapa que se segue, fixa-se o valor de deformação angular determinado na primeira fase e varia-se a frequência segundo uma rampa logarítmica, de uma determinada frequência pequena até a máxima para a qual provou-se que o sistema permanece linear. O software Rheoplus coleta os dados relativos às propriedades viscométricas, $\eta'(\omega)$, $\eta''(\omega)$, $G'(\omega)$ e $G''(\omega)$, para cada frequência ω de excitação. Nesta etapa realizam-se cinco corridas experimentais para cada amostra e em seguida toman-se a média e o desvio padrão para o cálculo do erro experimental.

O modelo utilizado para o ajuste dos dados foi o de Maxwell com um espectro de tempos de relaxação, visto na seção (2.11.2). Uma característica comum a todos os resultados obtidos foi o fato de que o módulo viscoso predominou sobre o elástico para o fluido analisado, indicando que na faixa de frequências angulares analisada o comportamento das amostras apresentou um caráter mais de líquido, ou seja, dissipativo.

É interessante notar que $G'(\omega)$ possui alto valor para altas frequências e tende a zero em baixas, o que pode ser entendido levando-se em conta a relação entre a escala de tempo característico do experimento t_c (que pode ser definida como o inverso da frequência) e o tempo do material τ , (que é fixo) portanto, em um regime de altas frequências o t_c é pequeno em comparação a τ fazendo com que o escoamento perceba a macromolécula já distendida. O que por sua vez provoca um aumento da percepção do caráter sólido (elástico) do material dado que a estrutura polimérica tenta relaxar mas é impedida pelo escoamento. O contrário também é válido e, em razão disso, o módulo elástico tende a zero em um regime de pequenas frequências.

Na figura (3.10) tem-se os resultados experimentais da obtenção do módulos viscoelásticos η' e η'' , bem como do ajuste feito através do modelo de Maxwell dado na seção (2.11.2). Para este ajuste, $N = 5$, já se mostrou o suficiente, como se vê na referida figura.

$$\eta'(\omega) = \sum_{j=1}^5 \frac{\eta_j}{1 + (\alpha_j \omega)^2}, \quad (3.19)$$

e

$$\eta''(\omega) = \sum_{j=1}^5 \frac{\eta_j \alpha_j \omega}{1 + (\alpha_j \omega)^2}. \quad (3.20)$$

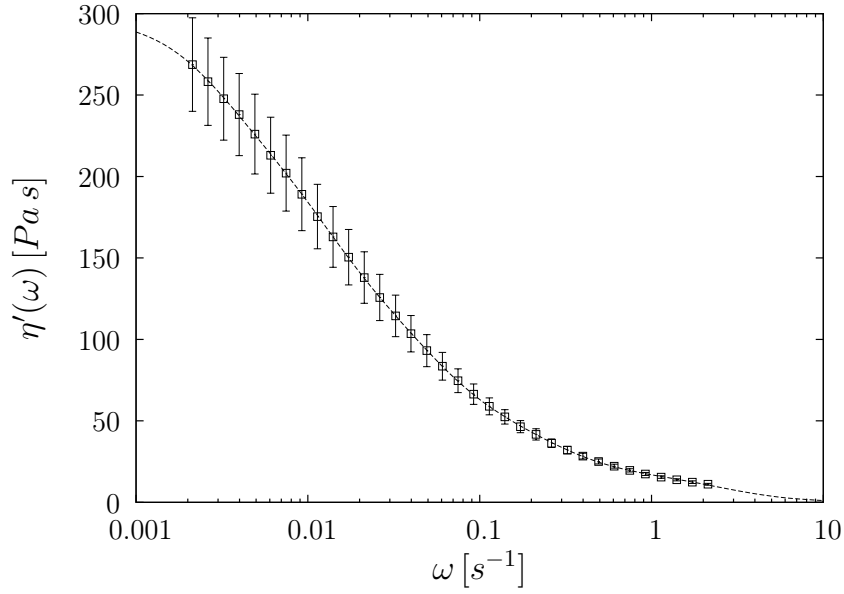
Na tabela (3.2) pode-se ver os valores das constantes de ajuste η_j e α_j para $j = 1, \dots, 5$, da função $\eta'(\omega)$. E na tabela (3.3) vê-se estes mesmos parâmetros de ajuste para o módulo de armazenamento $\eta''(\omega)$.

Tabela 3.2: Valores das constantes de ajuste η_j e α_j do modelo de Maxwell para a função $\eta'(\omega)$.

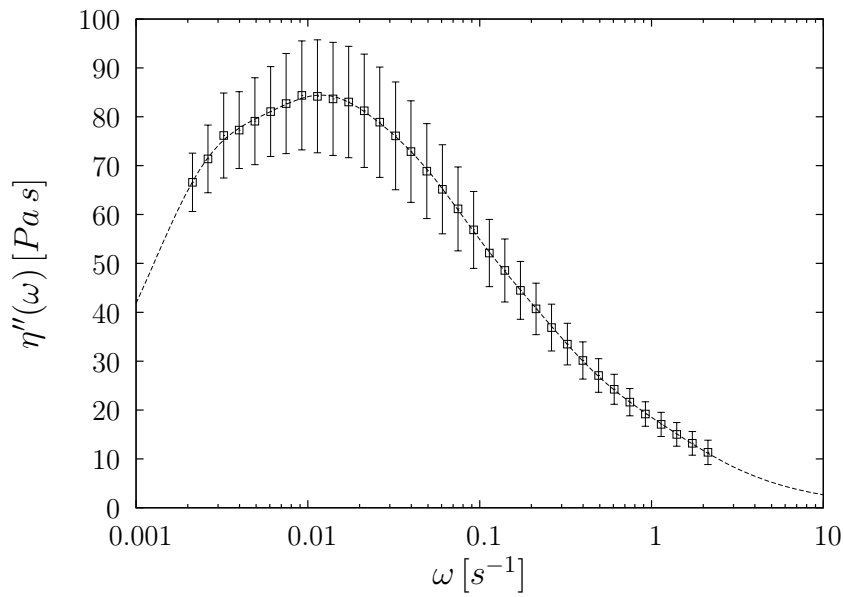
| j | $\eta_j [cP]$ | $\alpha_j [s]$ |
|-----|---------------|----------------|
| 1 | 69 ± 3 | 18.0 |
| 2 | 32 ± 2 | 3.5 |
| 3 | 84 ± 3 | 317.2 |
| 4 | 16 ± 1 | 0.4 |
| 5 | 95 ± 3 | 75.0 |

Tabela 3.3: Valores das constantes de ajuste η_j e α_j do modelo de Maxwell para a função $\eta''(\omega)$.

| j | $\eta_j [cP]$ | $\alpha_j [s]$ |
|-----|---------------|----------------|
| 1 | 67 | 21.4 |
| 2 | 92 | 79.8 |
| 3 | 15 | 0.9 |
| 4 | 98 | 386.4 |
| 5 | 35 | 5.1 |



(a) Módulo viscoso $\eta'(\omega)$



(b) Módulo elástico $\eta''(\omega)$

Figura 3.10: Módulos viscoelásticos η' e η'' obtidos experimentalmente. Os quadrados abertos em (a) denotam o módulo viscoso η' . Os quadrados abertos em (b) denotam o módulo elástico η'' . Ambos os resultados foram obtidos de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 \text{ ppm}$ a 20°C . As linhas pontilhadas em (a) e (b) representam os respectivos ajustes feito pelo modelo de Maxwell dado pelas equações (3.19) e (3.20), respectivamente.

Na figura (3.11) apresenta-se o resultado dos módulos viscoelásticos $G'(\omega)$ e $G''(\omega)$, bem como do ajuste feito pelo modelo de Maxwell dado na seção (2.11.2) para $N = 5$, i.e.,

$$G'(\omega) = \sum_{j=1}^5 \frac{\eta_j \alpha_j \omega^2}{1 + (\alpha_j \omega)^2}, \quad (3.21)$$

e

$$G''(\omega) = \sum_{j=1}^5 \frac{\eta_j \omega}{1 + (\alpha_j \omega)^2}. \quad (3.22)$$

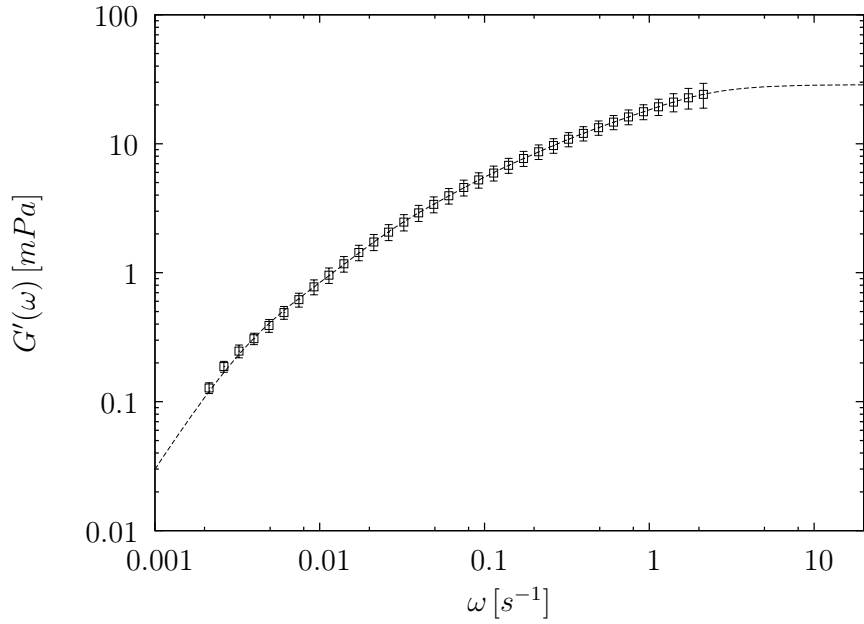
Nas tabelas (3.4) e (3.5) tem-se os valores dos parâmetros de ajuste, η_j e α_j , para as funções $G'(\omega)$ e $G''(\omega)$, respectivamente.

Tabela 3.4: Valores das constantes de ajuste η_j e α_j do modelo de Maxwell para a função $G'(\omega)$.

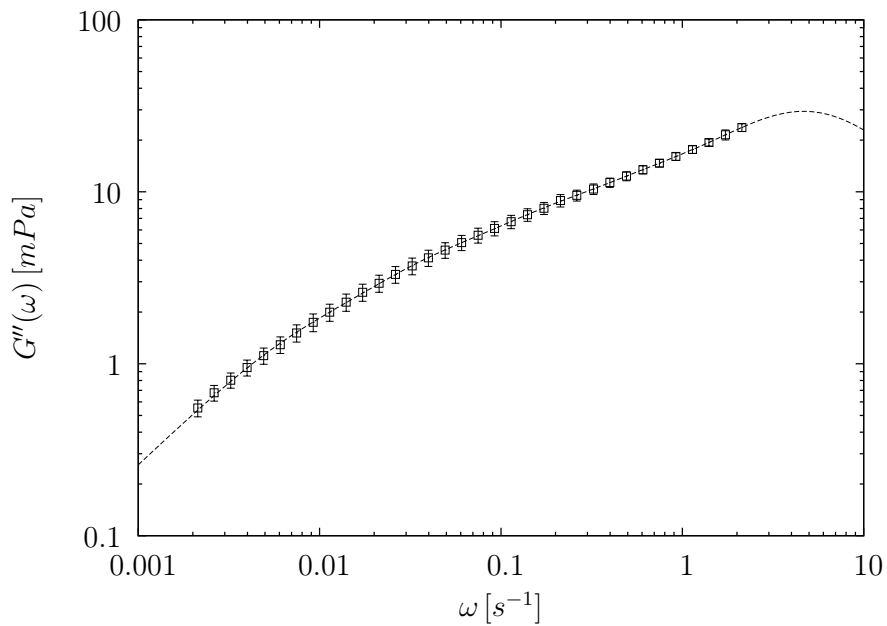
| j | $\eta_j [cP]$ | α_j |
|-----|---------------|------------|
| 1 | 91 | 39 |
| 2 | 125 | 216 |
| 3 | 21 | 3 |
| 4 | 10 | 0.7 |
| 5 | 42 | 10 |

Tabela 3.5: Valores das constantes de ajuste $\eta_j cP$ e α_j do modelo de Maxwell para a função $G''(\omega)$.

| j | $\eta_j [cP]$ | α_j |
|-----|---------------|------------|
| 1 | 78 | 22 |
| 2 | 32 | 5 |
| 3 | 13 | 1 |
| 4 | 126 | 115 |
| 5 | 11 | 0.2 |



(a) Módulo elástico $G'(\omega)$



(b) Módulo viscoso $G''(\omega)$

Figura 3.11: Módulos viscoelásticos G' e G'' obtidos experimentalmente. Os quadrados abertos em (a) denotam o módulo elástico G' . Os quadrados abertos em (b) denotam o módulo viscoso G'' . Ambos os resultados foram obtidos de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 \text{ ppm}$ a 20°C . As linhas pontilhadas em (a) e (b) representam o ajuste feito pelo modelo de Maxwell dado pelas equações (3.21) e (3.22), respectivamente.

Uma propriedade muito importante do fluido que pode ser avaliada através do cisalhamento oscilatório de pequena amplitude é a viscosidade na ausência de cisalhamento, chamada de η_0 , ou seja, a viscosidade do fluido em equilíbrio. O que é realizado observando-se que uma condição de ausência de cisalhamento implica em nenhum escoamento e, portanto, em frequência angular zero. Aplicando esta condição à equação (3.19), obtém-se que:

$$\eta_0 = \eta'(\omega) = \sum_{j=1}^5 \eta_j, \quad (3.23)$$

e de acordo com os dados da tabela (3.2), considerando também o somatório dos erros, tem-se que $\eta_0 = (297 \pm 12) \text{ cP}$. Agora, ao considerar o máximo dos erros tem-se $\eta_0 = 309 \text{ cP}$. Compare este resultado com o resultado de μ_0 do gráfico da figura (3.9). Neste última figura se vê o seguinte valor $\mu_s(\dot{\gamma}) = 307.87 \text{ cP}$ para $\dot{\gamma} = 0.04 \text{ s}^{-1}$. Portanto, conclui-se que existe uma boa concordância entre o cálculo da viscosidade η_0 ou μ_0 pelo método descrito na equação (3.23), no limite $\dot{\gamma} \rightarrow 0$, e o resultado obtido no gráfico da figura (3.9) para este mesmo valor de η_0 .

3.3.3 Resultado para o escoamento por Impulso de deformação.

Como dito na seção (2.10), o impulso de deformação é utilizado para obter-se a função relaxação de tensão $\Phi(s)$ para um dado fluido complexo. O experimento é realizado com temperatura constante de 20°C ., portanto, o primeiro passo é fixar-se a temperatura da placa fixa do reômetro, na qual a amostra será depositada.

Deve-se em seguida definir o espaçamento ótimo entre os discos, que neste caso foi $\delta = 0.4 \text{ mm}$, e posteriormente coloca-se o fluido no volume necessário para completar-se o espaçamento selecionado. Na etapa que se segue, define-se, através do programa Rheoplus, a deformação angular inicial, γ_0 , que será aplicada de forma instantânea sobre o fluido, a qual deve ser a menor possível de forma a garantir que o regime de escoamento é de pequena deformação, ou seja, viscoelástico linear. No entanto, deve-se atentar que quanto menor for este parâmetro γ_0 , menor será o torque aplicado e, portanto, pode-se facilmente entrar em uma condição de torque menor que o torque mínimo, a partir do qual as medidas não apresentam qualquer significado. Define-se também, através do software o intervalo em que os dados são coletados.

Escolhido o γ_0 , aplica-se o impulso (ou excitação) com a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ instantâneo, da forma $\dot{\gamma} = \gamma_0/dt$, em que $dt \ll 1 s$. Feito isso, através do software supracitado, coleta-se os dados referentes à variação da função relaxação de tensão para um dado intervalo de tempo, o qual é indefinido a priori, pois depende do operador, o qual deve interromper o ensaio assim que perceber a estabilização da tensão em um platô constante, o que indica que a tensão relaxou completamente.

Seguindo estes passos, obteve-se o gráfico da figura (3.12) que mostra-se, também, o ajuste feito pelo modelo de Maxwell para a função relaxação de tensão $\Phi(s)$, de acordo com a equação (3.24).

$$\Phi(s) = \frac{\eta_1}{\alpha_1} \exp(-s/\alpha_1). \quad (3.24)$$

No gráfico da figura (3.12), tem-se o intervalo de variação Δs para o tempo s como sendo $0.008 s < \Delta s < 0.23 s$.

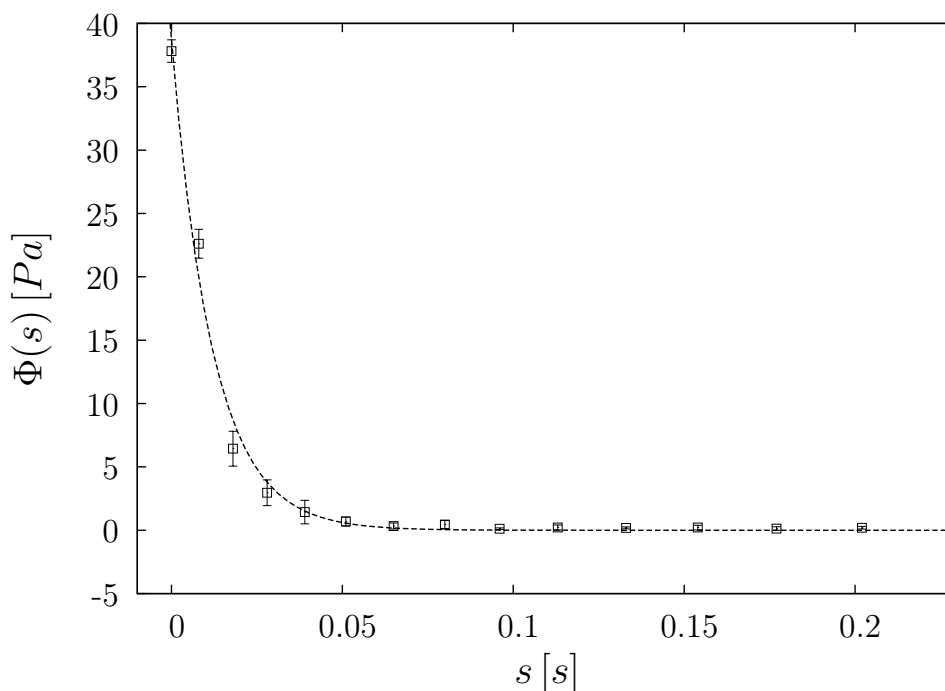


Figura 3.12: Quadrados abertos denotam os dados experimentais da função relaxação de tensão $\Phi(s)$ para uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 ppm$. A linha pontilhada trata do ajuste feito pela equação (3.24) no qual obteve-se: $\eta_1 = 0.4654 Pa s$ e $\alpha_1 = 0.01204 s$. Parâmetros: $\gamma_0 = 0.1$ e $dt = 8 \times 10^{-3} s$. Fonte: [51].

Ainda no gráfico da figura (3.12), observa-se que a tensão relaxa muito rapidamente, sendo necessário apenas um tempo de relaxação⁵, $\alpha_1 = 0.01204 \text{ s}$, para se ter um ajuste satisfatório dos dados experimentais. Isso se deve, primeiramente, ao fato de que a fração volumétrica do polímero da suspensão ensaiada é bem menor que 1% e, ainda, ao fato de se estar no regime de pequenas deformações, $\gamma_0 = 0.1 \ll 1$. O fato de se ter apenas um tempo de relaxação para a suspensão diluída, $\phi \ll 1$, é perfeitamente adequado à teoria, já que uma maior concentração da suspensão implica em características elásticas mais preponderantes, o que está relacionado ao caso das cadeias poliméricas interagirem mais efetivamente em soluções concentradas, formando estruturas muito complexas, as quais apresentam uma grande capacidade de se deformarem quando uma taxa de cisalhamento externa é aplicada e também de retornarem à sua configuração inicial, ou seja, estas estruturas injetam elasticidade no sistema da suspensão e, portanto, o fluido passa a apresentar uma maior memória e conseqüentemente pode-se perceber outros espectros de tempos de relaxação.

Vale destacar que o fluido, mesmo num regime diluído, porém quando submetido a uma maior deformação $\gamma_0 \approx 1$, pode apresentar outros espectros de tempos de relaxação uma vez que em escoamentos mais intensos as macromoléculas do fluido sofrem um maior estiramento o que provoca o surgimento de outros efeitos de ordem secundárias, aos quais está associado o término do processo de relaxação da tensão, i.e., o retorno do fluido a sua configuração de repouso [51]. É o que se verá no caso numérico da seção (6.1.7).

⁵O que é um valor alto quando comparado ao tempo de relaxação da água, que é em torno de 10^{-13} s .

CAPÍTULO 4

MODELAGEM MATEMÁTICA DE UMA SUSPENSÃO POLIMÉRICA

O ponto de partida para a análise de escoamento incompressíveis de fluidos poliméricos são a equação da continuidade (ou equação da conservação de massa) e a equação da quantidade de movimento (apêndice (II)), que são dadas respectivamente por:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.1)$$

e

$$\nabla \cdot \Sigma = 0. \quad (4.2)$$

Porém quando o interesse é resolver o problema de um escoamento de fluido não-newtoniano surgem algumas dificuldades adicionais, pois equações constitutivas mais complexas aparecem. Geralmente costuma-se escrever a equação da quantidade de movimento, para fluidos poliméricos, destacando a parte referente a contribuição do solvente e a parte referente as macromoléculas, assim:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_s + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m, \quad (4.3)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}_s$ é a contribuição do solvente (que possui comportamento newtoniano) e $\boldsymbol{\sigma}_m$ é a contribuição das macromoléculas presentes no polímero. O tensor de tensões adicional $\boldsymbol{\sigma}_m$

deve ser obtido através de equações constitutivas provenientes de teorias sobre reologia de fluidos, como por exemplo, a teoria cinética, a teoria de redes de suspensões concentradas e polímeros fundidos e a teoria da reptação [41]. Como este tensor não pode, geralmente, ser escrito explicitamente em função do gradiente de velocidade (como no caso da contribuição newtoniana) portanto tem-se que escreve-lo em termos de outros tensores como se verá mais adiante.

4.1 Fluido Newtoniano Generalizado

Como se viu no capítulo de introdução, existe um grande número de equações constitutivas, que buscam descrever o comportamento reológico dos fluidos poliméricos. Estas equações podem ser enquadradas em diferentes grupos, de acordo com a sua forma, sua natureza matemática e sua capacidade de predição de funções materiais [8]. Cita-se, inicialmente, o Fluido Newtoniano Generalizado (FNG), este consiste na generalização do modelo de fluido newtoniano para fluidos nos quais a viscosidade é uma função da magnitude do tensor taxa de deformação \mathbf{D} . Os modelos FNG são uma primeira generalização da mecânica dos fluidos clássica para a mecânica dos fluidos não-newtonianos. Nessa situação os efeitos elásticos não são preditos, uma vez que essa categoria de modelos ainda não considera o cálculo do tensor $\boldsymbol{\sigma}_m$, estes modelos podem ser aplicados satisfatoriamente somente em casos em que ocorrem escoamentos por cisalhamento e taxas de deformação elevadas. Para FNG tem-se que substituir a equação (4.4) abaixo na equação (4.3).

$$\boldsymbol{\sigma}_s = 2\mu(\dot{\gamma})\mathbf{D} \text{ e } \boldsymbol{\sigma}_m = \mathbf{0}, \quad (4.4)$$

e a viscosidade $\mu(\dot{\gamma})$ é agora função da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ que é igual ao segundo invariante do tensor taxa de deformação \mathbf{D} (apêndice (I)). Existem muitos modelos empíricos que fornecem relações matemáticas para a viscosidade em função da taxa de deformação mas geralmente só são válidos para determinados fluidos ou em determinadas regiões de aplicação [8].

Digno de nota, novamente, tem-se o modelo mais simples e mais conhecido para a viscosidade dependente de $\dot{\gamma}$ que é a chamada de lei de Potência (“*Power-Law*”) [8], como

visto na equação (2.80):

$$\mu(\dot{\gamma}) = k\dot{\gamma}^{n-1}, \quad (4.5)$$

em que k é um parâmetro de consistência e n é o expoente deste modelo. Esses parâmetros são dependentes do fluido e são obtidos por ajustes (fit) de curvas a dados experimentais. Este modelo permite a obtenção de soluções analíticas para uma grande variedade de escoamentos, sendo possível até representar o efeito pseudo-plástico (“*shear-thinning*”).

O modelo de FNG tem a deficiência de não predizer os efeitos elásticos característicos de fluidos poliméricos. Do ponto de vista numérico o uso de FNG não apresenta grandes dificuldades em comparação ao estudo dos fluidos newtonianos. Por este motivo estes modelos são muito utilizados no estudo de aplicações industriais, como processos de extrusão e injeção, para predição de algumas etapas ou características dos referidos processos que estão associadas somente a fenômenos puramente viscosos e para os quais os efeitos da viscosidade não-newtoniana tem grande importância.

4.1.1 Fluido Viscoelástico Não-Linear

Os modelos matemáticos para fluidos viscoelásticos não-lineares são mais robustos pois permitem descrever ao menos qualitativamente efeitos elásticos e características não-lineares, como diferenças de tensões normais e viscosidade não-newtoniana e por isso serão tratados nesta tese. Os modelos diferenciais não lineares podem ser obtidos a partir do modelo para fluido viscoelástico linear, na sua forma diferencial, como visto no capítulo 2. As modificações realizadas consistem na substituição das derivadas temporais pela derivada Oldroyd e/ou na inclusão de termos não lineares e demais parâmetros nas equações. Assim as equações constitutivas obtidas serão objetivas (apêndice (III)).

Abaixo explicita-se a relação que define a derivada Oldroyd alta do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$,

$$\frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} - \boldsymbol{\sigma}(\nabla\mathbf{u})^T - (\nabla\mathbf{u})\boldsymbol{\sigma}. \quad (4.6)$$

Estes modelos não estão limitados apenas a pequenas deformações, como é o caso da viscoelasticidade linear, são modelos mais próximos da realidade que permitem obter informações qualitativas em relação a efeitos viscoelásticos lineares e não-lineares em vários tipos de escoamentos. Algumas vezes os modelos são encontrados usando o tensor confor-

mação, que possui relação com a configuração espacial (extensão) das macromoléculas do polímero e pode ser relacionado com o tensor de tensões. No entanto, apesar de se ter algumas vantagens em relação a estabilidade, se tem algumas desvantagens com relação a maior quantidade de memória computacional requerida [63].

4.2 Modelo Oldroyd-B

O modelo Oldroyd-B (Oldroyd, 1950) deriva da teoria cinética para suspensões poliméricas concentradas e polímeros fundidos [8]. A cadeia polimérica é representada por um conjunto de esferas unidas por uma mola como mostra a figura (4.1). Nesta configuração as esferas representam o centro de massa do sistema e estão relacionadas com a interação hidrodinâmica entre o solvente e as macromoléculas da suspensão polimérica (a força de arrasto viscoso do solvente sobre as macromoléculas). As molas representam o efeito de elasticidade das macromoléculas ou o efeito restaurador do polímero. Esta configuração esfera-mola denominada “*dumbbell*” é simplificada assumindo-se um comportamento de mola linear ou mola de Hooke.



Figura 4.1: Representação esquemática de uma macromolécula no modelo “*dumbbell*”. O vetor \mathbf{r} liga as extremidades da macromolécula de ponta-a-ponta e δ é o comprimento de um monômero individual, como visto na seção (2.2).

Neste ponto se assume [1] o equilíbrio entre as forças devido ao movimento Browniano F_b e as forças elásticas F_e , i.e., $F_b \approx F_e$, em que considera-se a mola linear de Hooke para modelar a força browniana de restauração da macromolécula, como sendo:

$$F_b \approx Gr, \quad (4.7)$$

em que G é a constante da mola e $r = \|\mathbf{r}\|$ é a distância de ponta a ponta da macromolécula como na figura (4.1). Neste ponto note que evidentemente r varia no tempo, i.e., $r = r(t)$ e assumi-se que, em $t = 0$, a macromolécula encontra-se em seu regime totalmente relaxado (equilíbrio) e neste caso usa-se $r = a$.

O movimento browniano possui energia $E = K_B T$ [24], em que K_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Pelo fato de ser, ainda, $E = \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$, pode-se escrever:

$$F_b = \frac{3K_B T}{a}, \quad (4.8)$$

aqui considera-se que $\|\mathbf{r}\| = r \approx a$ como sendo uma escolha típica da distância entre as extremidades da macromolécula em configuração randômica correspondendo à configuração de equilíbrio, como já dito anteriormente. De (4.7) e (4.8) determina-se, a título de ilustração, que o coeficiente elástico da mola (ou constante da mola) em termos da energia E será dada por:

$$G = \frac{3K_B T}{a^2} = \frac{3E}{a^2}. \quad (4.9)$$

A interação hidrodinâmica entre a molécula e o solvente é representado pelo arrasto viscoso sobre às esferas que constituem a mesma. Neste modelo *dumbbell* a força viscosa, F_v , é definida como a força exercida numa esfera isolada de raio¹ a pelo solvente de viscosidade μ . Para baixos números de Reynolds tem-se, como em [2]:

$$F_v = 6\pi\mu a \frac{dr}{dt}. \quad (4.10)$$

No equilíbrio termodinâmico, o balanço entre F_e e F_v resultam em,

$$\frac{dr}{dt} = \frac{G}{C_v} r, \quad (4.11)$$

em que $C_v = 6\pi\mu a$ é o coeficiente de arrasto viscoso. Se integrarmos a equação (4.11) com a condição inicial $r(0) = r_0$, obtém-se:

$$r(t) = r_0 \exp(t/\tau). \quad (4.12)$$

¹Note que aqui assumi-se, também, que a distância de equilíbrio é igual ao raio da esfera.

E esta última equação fornece a variação do comprimento de equilíbrio médio r em função do tempo $t \geq 0$. Note que esta variação é crescente em t e varia exponencialmente. Aqui é importante destacar que:

$$\tau = \frac{C_v}{G} = \frac{2\pi\mu a^3}{K_B T}, \quad (4.13)$$

é definido como o tempo de relaxação da macromolécula.

A título de ilustração, ao substituir a equação (2.14), que diz que $a \approx \sqrt{N}\delta$, na equação (4.13), obtém-se:

$$\tau \approx \frac{2\pi\mu N^{3/2}\delta^3}{K_B T}. \quad (4.14)$$

Como dito na seção (2.2) o número N corresponde ao número total de monômeros e assim podemos definir $N = Pt/P_i$, sendo Pt o peso total do polímero e P_i o peso de um único monômero. Desta maneira conclui-se que:

$$\tau \propto (Pt/P_i)^{3/2}. \quad (4.15)$$

A equação (4.15) mostra um resultado importante em que se observa que polímeros de altos pesos moleculares apresentam maiores tempos de relaxação [28]. Dito de outra forma, o efeito elástico ou de memória de uma suspensão fluida constituída desses polímeros pode causar grandes mudanças num escoamento. Isto explica (dentre outros fatores) porque apenas poucos *ppm* de um polímero de alto peso molecular adicionado a escoamentos turbulentos pode reduzir consideravelmente a queda de pressão [18],[36].

4.2.1 Tensor de Tensões não-Linear e o Tensor Adaptação B

Como feito em [1] usa-se neste trabalho a parte deviatória $\boldsymbol{\sigma}$ como sendo:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu_s(\phi, \dot{\gamma})\mathbf{D} + \bar{\boldsymbol{\sigma}}_B, \quad (4.16)$$

em que $\mu_s(\phi, \dot{\gamma})$ é a viscosidade dinâmica e $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento. O tensor $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_B$ é a contribuição da tensão elástica, devido à presença de macromoléculas. Este tensor pode ser interpretado como uma correlação entre o comportamento microscópico das macromoléculas e a resposta macroscópica obtida no escoamento.

Para uma suspensão diluída de polímeros, $\phi \ll 1$, pode-se considerar que a viscosidade efetiva do fluido pode ser calculada por $\mu_s(\phi, \dot{\gamma}) \approx \mu(1 + c\phi) = \mu_s(\phi)$, conforme visto na

seção (3.3), [25]. Aqui μ é a viscosidade do fluido base Newtoniano. No caso de esferas rígidas Einstein determinou $c = 5/2$. Como se viu na seção (3.3), os experimentos em reologia mostraram que para uma suspensão diluída de PAMA o melhor ajuste para o parâmetro c foi determinado como sendo $c = 1,53 \times 10^5$. Note que este parâmetro encontrado experimentalmente para a PAMA é bem maior que no caso para esferas rígidas e uma das explicações desta discrepância é o fato de que a PAMA possui um alto peso molecular.

Utiliza-se, também, em parte desse trabalho o modelo adimensional de Cross para se ter a viscosidade adimensional $\tilde{\mu}_s$ em função de De , como foi visto ao final da seção (3.3.1). Transcreve-se tal modelo adimensional, devido a sua importância. Segue:

$$\tilde{\mu}_s(De) = \frac{\mu_s(De)}{\mu_w} = \frac{\tilde{\mu}_0 + \tilde{\mu}_\infty (KDe)^m}{1 + (KDe)^m}, \quad (4.17)$$

em que: $\tilde{\mu}_0 = \mu_0/\mu_w$, $\tilde{\mu}_\infty = \mu_\infty/\mu_w$, $K = k/\tau_p$ e $De = \tau_p \dot{\gamma}$.

Uma proposta para o tensor $\boldsymbol{\sigma}_B$ que é não-newtoniano e surge devido à presença das macromoléculas é dado por [2]:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_B = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_0^V \boldsymbol{\sigma}_B d\mathbf{x} = n \langle \boldsymbol{\sigma}_B \rangle, \quad (4.18)$$

aqui $\langle \rangle$ representa uma média (ensemble average), i.e., $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_B$ é uma média volumétrica ao longo de um volume de controle V suficientemente grande para conter um número significativo de macromoléculas para se tirar esta média.

O vetor força elástica de restauração é dado por $\mathbf{F}_v = G\mathbf{r}$, em que G é um coeficiente de elasticidade e \mathbf{r} é o vetor da figura (4.1). O tensor de tensões associado a uma macromolécula é dado pelo produto diádico², $\boldsymbol{\sigma}_B = G\mathbf{r}\mathbf{r}^T$. E tomando uma média sob o elemento de volume N_m , tem-se [2]:

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_B \rangle = G \left(\frac{1}{N_m} \sum_{s=1}^{N_m} \mathbf{r}\mathbf{r}^T \right), \quad (4.19)$$

visto que $n = N_m/V$ (seção (2.2)) então pode-se concluir que:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_B = n \langle \boldsymbol{\sigma}_B \rangle = nG \langle \mathbf{r}\mathbf{r}^T \rangle. \quad (4.20)$$

O tensor do momento de inércia de deformação ou ainda tensor conformação das macromoléculas é definido por:

$$\mathbf{B}(t) = \langle \mathbf{r}\mathbf{r}^T \rangle = \frac{1}{N_m} \sum_{s=1}^{N_m} \mathbf{r}\mathbf{r}^T, \quad (4.21)$$

²Ver equação (I.46).

veja que $\mathbf{B}(t)$ é por definição um tensor positivo definido (apêndice (I)) e pode ser interpretado como o tensor que descreve o movimento das macromoléculas, mostrando tanto a posição em que elas estão sendo orientadas, como quanto elas se deformam no decorrer do tempo, quando da aplicação de um escoamento. E finalmente o tensor de tensões Σ será dado por:

$$\Sigma = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu_s(De)\mathbf{D} + nG\mathbf{B}(t). \quad (4.22)$$

E explicita-se o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ em termos de \mathbf{B} , na equação abaixo:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu_s(De)\mathbf{D} + nG\mathbf{B}(t). \quad (4.23)$$

Para o fechamento da equação (4.22) é necessário uma equação de evolução temporal para o tensor \mathbf{B} e pela relação entre forças de arrasto e viscosas, pode-se escrever:

$$6\pi\mu a \frac{d\mathbf{r}}{dt} + G\mathbf{r} = 0. \quad (4.24)$$

De (4.24) conclui-se, após multiplicar por \mathbf{r}^T dos dois lados e subtrair o termo da translação de corpo rígido e assumir um quadro de referência que roda e deforma com a macromolécula, a equação (4.25);

$$3\pi\mu a \frac{\delta_-(\mathbf{B})}{\delta t} + G\mathbf{B} - K_B T \mathbf{I} = 0, \quad (4.25)$$

em que,

$$\frac{\delta_-(\mathbf{B})}{\delta t} = \frac{D\mathbf{B}}{Dt} - \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} - \mathbf{B} \cdot (\nabla\mathbf{u})^T, \quad (4.26)$$

é a derivada Oldroyd alta (ver apêndice (III)) que pode ser entendida como a taxa de variação de \mathbf{B} visto por um observador que se deforma e translada com a macromolécula. O tensor elástico associado a conformação pode ser interpretado como um tensor de Green, $\mathbf{G} = \mathbf{C} - \mathbf{I}$, segundo uma descrição material Lagrangiana [3], onde \mathbf{I} é o tensor identidade. O coeficiente envolvendo $K_B T$ no termo da parte isotrópica, tensor \mathbf{I} , nada mais é do que uma compatibilização de unidade da equação usando a energia térmica Browniana, KT , já que nossa elasticidade está diretamente relacionada a agitação térmica browniana das moléculas do fluido base sobre a macromolécula.

Com essas considerações a equação (4.25) ficará na forma:

$$\frac{D\mathbf{B}}{Dt} = \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot (\nabla\mathbf{u})^T - \frac{K_B T}{\pi\mu a N \delta^2} \mathbf{B} + \frac{K_B T}{3\pi\mu a} \mathbf{I}. \quad (4.27)$$

Note ainda que, como pode-se escrever o tempo de relaxação τ como sendo $\tau = 2\pi\mu N^{3/2}\delta^3/K_B T$, então a equação (4.27) pode-se ser reescrita como sendo:

$$\frac{D\mathbf{B}}{Dt} = \underbrace{\nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot (\nabla\mathbf{u})^T}_{\text{Primeiro termo}} - \underbrace{\frac{2}{\tau} \left(\mathbf{B} - \frac{a^2}{3} \mathbf{I} \right)}_{\text{Segundo termo}}, \quad (4.28)$$

em que $\frac{D}{Dt}$ representa a derivada material³. Na equação (4.28) o primeiro termo representa o estiramento da macromolécula pelo escoamento e o segundo termo representa a relaxação do polímero devido ao movimento Brawniano.

O tensor conformação \mathbf{B} descreve a configuração instantânea das macromoléculas, sendo uma medida da deformação e da orientação na qual as macromoléculas são submetidas uma vez que um escoamento mais forte é aplicado [1]. Note que a equação diferencial (4.28) para o tensor conformação foi obtida mediante uma análise microestructural, considerando-se o equilíbrio termodinâmico do sistema, em que as forças viscosas se encontram em equilíbrio com as forças Brownianas restauradoras. Esta análise foi ainda considerada com base numa média volumétrica sobre todas as macromoléculas do polímero, e um referencial girando e deformando com a macromolécula (derivada oldroyd alta) foi considerado no sentido de preservar a indiferença material da equação (4.28) a qualquer sistema de referência [1].

Antes de se proseguir, abaixo tem-se os parâmetros físicos adimensionais fundamentais de nosso estudo:

1. Para um escoamento de um fluido de densidade ρ e viscosidade μ passando por um objeto de comprimento característico x e velocidade caracterísitca u_c , defini-se o número de Reynolds, Re , como sendo $Re = \rho u_c x / \mu$. Aqui é importante mencionar que a viscosidade μ é por convenção tomada como sendo a viscosidade de cisalhamento no limite de pequenas taxas de deformação γ_0 .
2. O parâmetro adimensional mais importante deste trabalho é o número de Deborah, o qual é dado pela razão entre o tempo de relaxação principal do polímero τ_p por um tempo característico do escoamento t_f . Assim:

$$De = \frac{\tau_p}{t_f}. \quad (4.29)$$

³Ver equação (II.7)

Importante destacar que o tempo de relaxação principal τ_p é definido como o maior tempo de relaxação, representando o mecanismo principal de interação entre as macromoléculas. A este tempo τ_p se seguem diversos outros tempos de relaxação secundários, aos quais está associado o término do processo de relaxação da tensão, ou seja, o retorno do material a sua condição não deformada, como se viu no capítulo 3.

O número de Deborah De nos fornece uma relação de quão alterado será o efeito elástico, ou seja, valores altos de De indicam que o efeito elástico é maior, já quando De tender a zero tem-se escoamentos puramente viscosos [1]. Deste modo pode-se dizer que o número de Deborah pode ser visto como sendo a taxa de cisalhamento adimensional dos escoamentos.

3. A extensibilidade do polímero L é dada pela razão entre o tamanho da macromolécula completamente estirada ℓ , e tem-se que $\ell \approx N\delta$ conforme seção (2.2) e a distância média correspondente ao estado de equilíbrio randômico a . Assim $L = \ell/a$.

Note que $L \approx \ell$, se, e só se, $De \approx 1$ ou $De \geq 1$, como poderá ser visto mais adiante no caso do escoamento extensional, por exemplo.

4.2.2 Modelo não-linear Dumbbell-FENE

Para tornar o problema mais compatível com a realidade, pois a mola de Hookean pode produzir uma elongação arbitrariamente grande no haltere (o que é impossível), é introduzido uma limitação na extensibilidade da macromolécula. Mudando a lei linear da mola para uma com extensão finita, i.e., $Gf(r)$, isto nos fornece o modelo de dumbbell-FENE (“*Finite Extensibility Non-linear Elasticity*”), em que a função $f(r)$ é o modelo não-linear da mola⁴ proposto, inicialmente, em [62] e é dada por:

$$f(r) = \frac{\ell^2}{\ell^2 - r^2}, \quad \text{com } r^2 = \text{tr}(\mathbf{B}). \quad (4.30)$$

Aqui faz-se a seguinte observação. Matematicamente, tem-se também $f(r)$ arbitrariamente grande quando r está muito próximo de ℓ ($r \approx \ell$), porém, assume-se nestes casos que a macromolécula está em seu estado quase máximo de extensibilidade, e assim, pode-se

⁴O modelo original proposto em [27] é $f(r) = (\ell/3r)F^{-1}(r/\ell)$, em que $F(z) = \coth(z) - 1/z$ é a função Langevin.

considerar que a mesma degrada para $r = \ell$. Este fato ficará mais evidente nos resultados numéricos do escoamento extensional na seção (5.5). Finalmente assumi-se que o tensor conformação \mathbf{B} é função apenas do tempo, i.e., para cada tempo t tem-se uma configuração instantânea da macromolécula que não depende da posição \mathbf{x} .

Com estas considerações as equações (4.23) e (4.28) ficarão escritas como sendo:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu_s(De)\mathbf{D} + nGf(r)\mathbf{B}(t), \quad (4.31)$$

e

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot (\nabla\mathbf{u})^T - \frac{2af(r)}{\tau_p\sqrt{\text{tr}(\mathbf{B})}} \left(\mathbf{B} - \frac{a^2}{3}\mathbf{I} \right). \quad (4.32)$$

No caso de ser $r \approx \ell$, que ocorrerá para altos valores de Deborah, viu-se acima que se trata do caso em que a macromolécula está quase totalmente estirada. Defini-se ainda este caso como sendo o regime anisotrópico [1], pois a macromolécula produz anisotropia⁵ dentro do escoamento, acarretando o surgimento de efeitos não-lineares, como o aparecimento da diferença de tensões normais $N_1 = \sigma_{11} - \sigma_{22}$.

Em contra partida tem-se a possibilidade de que $r \approx a \ll \ell$ então pode-se assumir $f(a) \approx 1$, pois:

$$f(a) = \frac{\ell^2}{\ell^2 - a^2} \approx \frac{\ell^2}{\ell^2} = 1, \quad (4.33)$$

e o modelo de mola linear pode ser usado. Este caso será denotado por regime elástico e ocorre quando $De \ll 1$.

Fisicamente falando é como se a macromolécula não percebesse o escoamento ficando quase em seu estado de equilíbrio randômico e diz-se que neste caso o fluido tem um comportamento quase newtoniano. O que explica este comportamento é o efeito Browniano das partículas do solvente que impedem as macromoléculas de voltarem a se deformar, mantendo sua distribuição randômica de equilíbrio, o que por sua vez evita a aparição de efeitos não-lineares.

⁵Característica que uma substância possui em que uma certa propriedade física varia com a direção.

4.2.3 Adimensionalização das Equações

Para adimensionalizar as equações (4.31) e (4.32) usam-se: $u_c = a/\tau_p$ como uma velocidade de referência e a viscosidade da água⁶ μ_w para adimensionalizar a viscosidade da suspensão polimérica μ_s . Note que desse modo tem-se o tempo de relaxação principal τ_p como escala típica de tempo e a como uma escala típica de comprimento.

Finalmente tem-se as equações (4.31) e (4.32) em sua forma adimensional dadas por:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\tilde{\mu}_s(De)\tilde{\mathbf{D}} + \underbrace{\frac{9\phi}{2} f(R)}_{\text{Conformação}} \tilde{\mathbf{B}}, \quad (4.34)$$

e

$$\frac{d\tilde{\mathbf{B}}}{d\tilde{t}} = \tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}} \cdot (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2f(R)}{\sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}} \left(\tilde{\mathbf{B}} - \frac{1}{3}\mathbf{I} \right), \quad (4.35)$$

em que utilizou-se também: $n = 3\phi/(4\pi a^3)$, $G = 3K_B T/a^2$, $\tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B}/a^2$, $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\sigma}\tau_p/\mu_w$, $\tilde{t} = t/\tau_p$, $R = r/a$, $L = \ell/a$, $f(R) = L^2/(L^2 - R^2)$, $\tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{D}\tau_p$ e $\tilde{\nabla} = \nabla a$.

Destaca-se novamente a importante relação para a viscosidade adimensional dada pelo modelo de Cross adimensional:

$$\tilde{\mu}_s(De) = \frac{\mu_s(De)}{\mu_w} = \frac{\tilde{\mu}_0 + \tilde{\mu}_\infty (KDe)^m}{1 + (KDe)^m}, \quad (4.36)$$

em que: $\tilde{\mu}_0 = \mu_0/\mu_w$, $\tilde{\mu}_\infty = \mu_\infty/\mu_w$, $K = k/\tau_p$ e $De = \tau_p\dot{\gamma}$, como apresentado ao final da seção (3.3.1).

Ressalta-se que o importante parâmetro, número de Deborah De , irá aparecer naturalmente quando na adimensionalização dos campos de velocidade que irão ser explorados neste trabalho, pois, como se viu acima, o parâmetro De não aparece na adimensionalização das equações (4.31) e (4.32).

⁶Aqui pode ser qualquer fluido base newtoniano de viscosidade μ de referência.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS ASSINTÓTICOS, NUMÉRICOS E COMPARAÇÃO COM ALGUNS RESULTADOS EXPERIMENTAIS – ESCOAMENTOS PERMANENTES

5.1 Introdução

É importante notar que o par de equações (4.34) e (4.35) formam um sistema fechado. Portanto, uma vez de posse da solução do tensor conformação \mathbf{B} é possível determinar o tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ e, a partir deste, obtém-se as quantidades reológicas do fluido em escoamento, conforme será visto ao longo deste trabalho. O presente capítulo traz soluções assintóticas e numéricas para os seguintes escoamentos permanentes: cisalhamento simples e extensional. É apresentado também resultados para o escoamento por impulso de deformação. A comparação numérico-experimental é apresentada para algumas quantidades reológicas do fluido no sentido de validar o modelo e as simulações numéricas. Ao final deste capítulo a seção (6.4) trata de uma nova forma de obtenção do tensor conformação

B usando-se da derivada de Jaumann.

Para a solução assintótica é considerado o regime de pequenas deformações das macromoléculas e nas vizinhanças do equilíbrio, $R \approx 1$, em que o parâmetro De será considerado como sendo $De \ll 1$. Desta maneira pode-se assumir que os termos não lineares $f(R)$ e R são tais que $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$. No caso numérico o parâmetro De é considerado arbitrário e portanto variando numa ampla faixa, i.e., $0 \leq De \leq 10$, e deste modo serão considerados, para a implementação numérica, o caso geral em que $f(R) = L^2/(L^2 - R^2)$ e $R = \sqrt{tr(\tilde{\mathbf{B}})}$ de acordo com a proposição de [36]. Vale ressaltar que dependendo do escoamento aplicado não se usará neste trabalho $De \gg 1$ (no máximo até $De = 20$), pois sabe-se que valores muito altos deste parâmetro são incompatíveis com observações experimentais. Ademais valores muito altos de De correspondem a situações de ruptura e, ou degradação, das macromoléculas.

As soluções numéricas desenvolvidas na presente tese foram obtidas com a implementação de códigos em linguagem de programação FORTRAN90. O método de integração numérica Runge-Kutta de quarta ordem (ver apêndice IV) foi implementado no presente contexto para solução numérica das equações diferenciais ordinárias não-lineares determinadas na equação (4.35). O passo de tempo adimensional $d\tilde{t}$ foi escolhido de forma a melhor capturar as propriedades físicas aqui investigadas. Para este fim a definição da escala de tempo numérica deve ser acoplada ao número de Deborah já que este parâmetro é definido com a razão entre as escalas de tempo microestrutural do fluido e o tempo característico do escoamento. Portanto o parâmetro $De = \tau_p \dot{\gamma}$ foi vinculado ao passo de tempo $d\tilde{t}$, conforme definição a seguir. Para escoamentos cisalhantes permanentes, propôs-se que:

$$d\tilde{t} = 10^{-3} \times \min\{1, De^{-1}\}. \quad (5.1)$$

Sendo τ_p o tempo de relaxação principal do polímero deve-se considerar $dt \ll \tau_p$, ou em termos adimensionais, $d\tilde{t} \ll 1$. Ademais, usa-se ainda $dt \ll 1/\dot{\gamma}$, de onde obtém-se que $d\tilde{t} \ll 1/De$.

Para os escoamentos oscilatórios (transiente)¹, além das escalas usadas em (5.1), foi considerado uma nova escala de tempo $1/\omega$. Consequentemente $dt \ll 1/\omega$, ou em termos adimensionais, $d\tilde{t} \ll 1/\tilde{\omega}$. Deste modo o passo de tempo adimensional para os escoamentos

¹Aqui também inclui o escoamento extensional oscilatório.

oscilatórios com frequência ω , será dado por:

$$d\tilde{t} = 10^{-3} \times \min \left\{ 1, (\tilde{\omega})^{-1}, De^{-1} \right\}, \quad (5.2)$$

em que $\tilde{\omega} = \tau_p \omega$. Desta maneira os passos de tempos numéricos apresentam consistência física com a evolução configuracional da macromolécula.

É importante destacar que para se iniciar o processo de evolução temporal do algoritmo de Runge-Kutta é necessário impor uma condição inicial para o problema de escoamento investigado². Tendo em vista que na condição de equilíbrio (sem escoamento) a macromolécula está totalmente relaxada, é natural propor que em $t = 0$ se tenha $\mathbf{B}(0) = \frac{1}{3}\mathbf{I}$.

5.2 Convergência dos dados numéricos.

Para garantir que os dados numéricos do presente trabalho estão convergindo dentro de uma margem de erro tendo por base medidas experimentais, apresenta-se inicialmente esta seção. Dos resultados experimentais tem-se que os erros relatados no trabalho [51] ficam em torno de 10^{-3} , sendo muito difícil conseguir uma margem menor, pois os experimentos apresentam certas limitações. Porém, no âmbito numérico pode-se trabalhar numa margem de erro em torno de 10^{-5} . Para conseguir estimar este erro dentre os dados numéricos, faz-se a evolução temporal da componente adimensional $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ até um determinado valor suficientemente grande de \tilde{t} para se garantir que apenas a parte da conformação das macromoléculas da função $\tilde{\sigma}_{12}$ torna-se praticamente constante dentro de uma faixa de amplitude 10^{-5} .

As simulações foram realizadas para vários valores do parâmetro do número de De e em seguida verifica-se o valor do módulo da contribuição de conformação da função $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$. A função $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ é considerada do escoamento por cisalhamento simples, que pode ser visto com mais detalhe na próxima seção.

Ao fazer a evolução temporal de $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$, para cada De , observa-se que o tempo adimensional \tilde{t} aumenta no sentido de se alcançar a desigualdade $|\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})| < 10^{-5}$ a partir deste tempo \tilde{t} . Na tabela (5.1) se vê o conjunto de quatro valores do parâmetro De e seus respectivos valores do tempo adimensional \tilde{t} a partir do qual ocorreu a margem de erro desejada. Na

²Aqui tem-se na verdade um problema de valor inicial PVI. Veja equação (IV.12).

figura (5.1) mostra-se a evolução temporal da contribuição das macromoléculas da função $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ para os mesmos quatro parâmetros De da tabela (5.1). Nesta mesma figura fica mais evidente³ que para um tempo adimensional $\tilde{t} = t/\tau_p > 4$ tem-se uma convergência dos dados numéricos, dentro da margem de erro estabelecida, para o cisalhamento simples. Para o cisalhamento extensional oscilatório foi necessário também capturar as soluções para $\tilde{t} > 4$, a fim de se garantir a convergência dentro desta mesma margem de erro.

Tabela 5.1: Valor do tempo adimensional \tilde{t} a partir do qual a contribuição elástica da função $\tilde{\sigma}_{12}$ possui um comportamento constante.

| De | $\tilde{t} = t/\tau_p$ | $ \tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t}) $ |
|------|------------------------|------------------------------------|
| 0.1 | 2.12 | $< 10^{-5}$ |
| 1.0 | 2.85 | $< 10^{-5}$ |
| 10.0 | 3.45 | $< 10^{-5}$ |
| 50.0 | 6.25 | $< 10^{-5}$ |

Por fim, destaca-se que a rápida e eficiente convergência dos dados numéricos se deve a robustez do método de Runge-Kutta de quarta ordem (ver detalhes no apêndice IV) e ao fato de se estar escolhendo o passo de tempo adimensional $d\tilde{t}$ vinculado aos parâmetros físicos do escoamento conforme equação (5.1).

³Na verdade $\tilde{t} > 4$ já se mostrou suficiente uma vez que trabalharemos com De até 20.

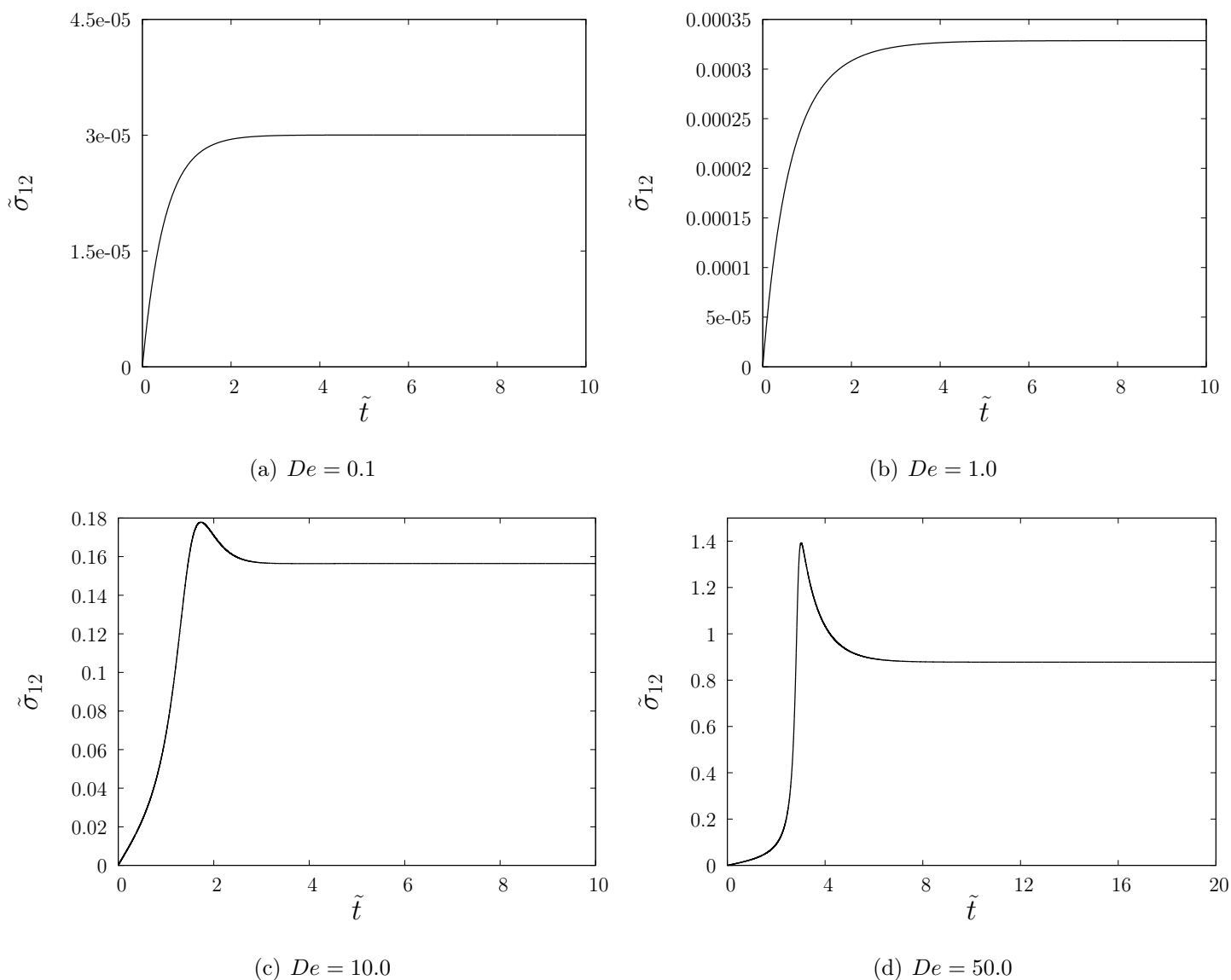


Figura 5.1: Evolução temporal somente da contribuição da conformação das macromoléculas da função $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ para quatro valores do parâmetro De para o escoamento por cisalhamento simples. Em: (a) $De = 0.10$, (b) $De = 1.0$, (c) $De = 10.0$ e (d) $De = 50.0$. Note que os casos (c) e (d) apresentam resultados semelhantes, pois a macromolécula já atingiu seu estiramento máximo para altos números de Deborah. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

5.3 Cisalhamento Simples

Apresenta-se agora os resultados numéricos e experimentais da primeira diferença de tensões normais adimensional, $\tilde{N}_1 = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22}$, para o cisalhamento simples visto que ela é uma grandeza reológica importante no estudo de fluidos elásticos. Os resultados relativos à tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}$ e, conseqüentemente, da viscosidade adimensional da suspensão polimérica, $\tilde{\mu}_s$, serão tratados na seção (5.3.4).

Considere o campo dimensional de velocidade do cisalhamento simples dado por $\mathbf{u} = (\dot{\gamma}x_2, 0, 0)$. Tomando a velocidade característica como sendo $u_c = a/\tau_p$, em que $De = \dot{\gamma}\tau_p$, o campo de velocidade adimensional, pode ser expresso por:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{u_c} = \left(\frac{\dot{\gamma}x_2\tau_p}{a}, 0, 0 \right) = (De\tilde{x}_2, 0, 0), \quad (5.3)$$

em que $\tilde{x}_2 = x_2/a$. Portanto o tensor gradiente de velocidade e o tensor taxa de deformação adimensionais, serão dados, respectivamente por:

$$\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} 0 & De & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & De & 0 \\ De & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

Com os tensores dado pela equação (5.4) obtém-se, a partir da equação (4.35), o seguinte sistema geral (caso $f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$) de equações diferenciais para as componentes do tensor \mathbf{B} , dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{22} - \frac{1}{3} \right), \\ \frac{d\tilde{B}_{33}}{d\tilde{t}} = -2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{33} - \frac{1}{3} \right), \\ \frac{d\tilde{B}_{12}}{d\tilde{t}} = De\tilde{B}_{22} - 2\frac{f(R)}{R}\tilde{B}_{12}, \\ \frac{d\tilde{B}_{21}}{d\tilde{t}} = De\tilde{B}_{22} - 2\frac{f(R)}{R}\tilde{B}_{21}, \\ \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = De(\tilde{B}_{12} + \tilde{B}_{21}) - 2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{11} - \frac{1}{3} \right). \end{array} \right. \quad (5.5)$$

Do sistema (5.5) conclui-se que $\tilde{B}_{22} = \tilde{B}_{33}$ e $\tilde{B}_{12} = \tilde{B}_{21}$.

5.3.1 Solução Assintótica para $De \ll 1$

Agora trabalha-se com o sistema (5.5) no limite assintótico em que $De \ll 1$, isto é, nas vizinhanças do equilíbrio da macromolécula. Desta maneira pode-se usar $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$ no referido sistema. Após os devidos cálculos obtém-se o seguinte sistema de equações diferenciais a se resolver:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -2 \left(\tilde{B}_{22} - \frac{1}{3} \right), \\ \frac{d\tilde{B}_{12}}{d\tilde{t}} = De\tilde{B}_{22} - 2\tilde{B}_{12}, \\ \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = 2De\tilde{B}_{12} - 2 \left(\tilde{B}_{11} - \frac{1}{3} \right). \end{cases} \quad (5.6)$$

Resolvendo-se analiticamente o sistema (5.6) e considerando-se um tempo adimensional $\tilde{t} > 4$, resulta:

$$\begin{cases} \tilde{B}_{22}(t) = \tilde{B}_{33}(t) = \frac{1}{3}, \\ \tilde{B}_{12}(t) = \tilde{B}_{21}(t) = \frac{1}{6}De, \\ \tilde{B}_{11}(t) = \frac{1}{6}De^2 + \frac{1}{3}. \end{cases} \quad (5.7)$$

Com as soluções obtidas em (5.7), utilizando-se a equação (4.34) pode-se determinar $\tilde{\sigma}_{11}$ e $\tilde{\sigma}_{22}$ adimensionais, no limite assintótico considerado:

$$\tilde{\sigma}_{11}(De) = \frac{3}{4}\phi De^2 + \frac{3}{2}\phi \quad \text{e} \quad \tilde{\sigma}_{22}(De) = \frac{3}{2}\phi. \quad (5.8)$$

Desta maneira obtém-se a primeira diferença de tensões normais adimensional, $\tilde{N}_1 = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22}$, dada pela equação:

$$\tilde{N}_1(De) = \frac{3\phi}{4}De^2 + \mathcal{O}(De^4) \quad (5.9)$$

No modelo teórico visto em [4] tem-se que para escoamentos de líquidos elásticos, no limite de pequenas taxas de deformação, a primeira e a segunda diferença de tensões normais são proporcionais ao quadrado da taxa de cisalhamento. Portanto,

$$N_1 = A\dot{\gamma}^2 + \mathcal{O}(\dot{\gamma}^4) \quad \text{e} \quad N_2 = B\dot{\gamma}^2 + \mathcal{O}(\dot{\gamma}^4), \quad (5.10)$$

em que A e B são constantes. Como aqui $De = \dot{\gamma}\tau_p$, a solução assintótica dada pela equação

(5.9) está de acordo com a ordem $\mathcal{O}(De^2)$ da equação (5.10).⁴ Assim para pequenos valores de $\dot{\gamma}$ tem-se que N_1 e N_2 tendem a zero. Por outro lado para maiores valores de $\dot{\gamma}$ ou De , N_1 já tem uma dependência quadrática com $\dot{\gamma}$ em contraste com σ_{12} que é linear com $\dot{\gamma}$ em baixas taxas de cisalhamento.

Na figura (5.2), conforme já apresentado em [2], mostra-se a primeira diferença de tensões normais adimensional em função do número de Deborah (De), para valores típicos de $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$. A solução numérica na figura (5.2) foi obtida via integração pelo método de Runge-Kutta do sistema (5.5). A referida figura apresenta uma comparação entre a solução assintótica, dada pela equação (5.9) e a solução numérica. Aqui, o número de De é uma medida da taxa de cisalhamento adimensional, e pode ser interpretado como a intensidade do escoamento em produzir o estiramento da macromolécula.

Conforme descrito no parágrafo anterior já existe uma dependência quadrática de \tilde{N}_1 com De , mesmo para baixos valores deste último parâmetro. Essa dependência quadrática quando $De \rightarrow 0$ é um indicador de que N_1 possui dependência não-linear no escoamento. Por outro lado, a figura (5.2) mostra que para valores de De maiores, a dependência quadrática não é mais válida já que outros efeitos não lineares associados com a deformação da macromolécula tornam-se importantes e conseqüentemente o limite assintótico dado pela equação (5.9) perde sua validade. O surgimento desta não-linearidade é devida ao estiramento que a macromolécula sofre pelo escoamento quando este é mais intenso. Deste modo pode-se afirmar que a função $f(R)$ que descreve a mola desvia-se consideravelmente da hipótese $f(R) \approx 1$. O encarte da figura (5.2) mostra a dependência entre \tilde{N}_1/ϕ e De^2 e uma excelente concordância entre as soluções analítica e numérica é observada para números de Deborah bem menores que a unidade.

⁴O modelo aqui examinado fornece $N_2 = 0$. Com o avanço dos reômetros pode-se medir também experimentalmente N_2 e verificar que $N_2 \neq 0$. Em geral $|N_2| \ll |N_1|$, ($N_1 \approx 10N_2$).

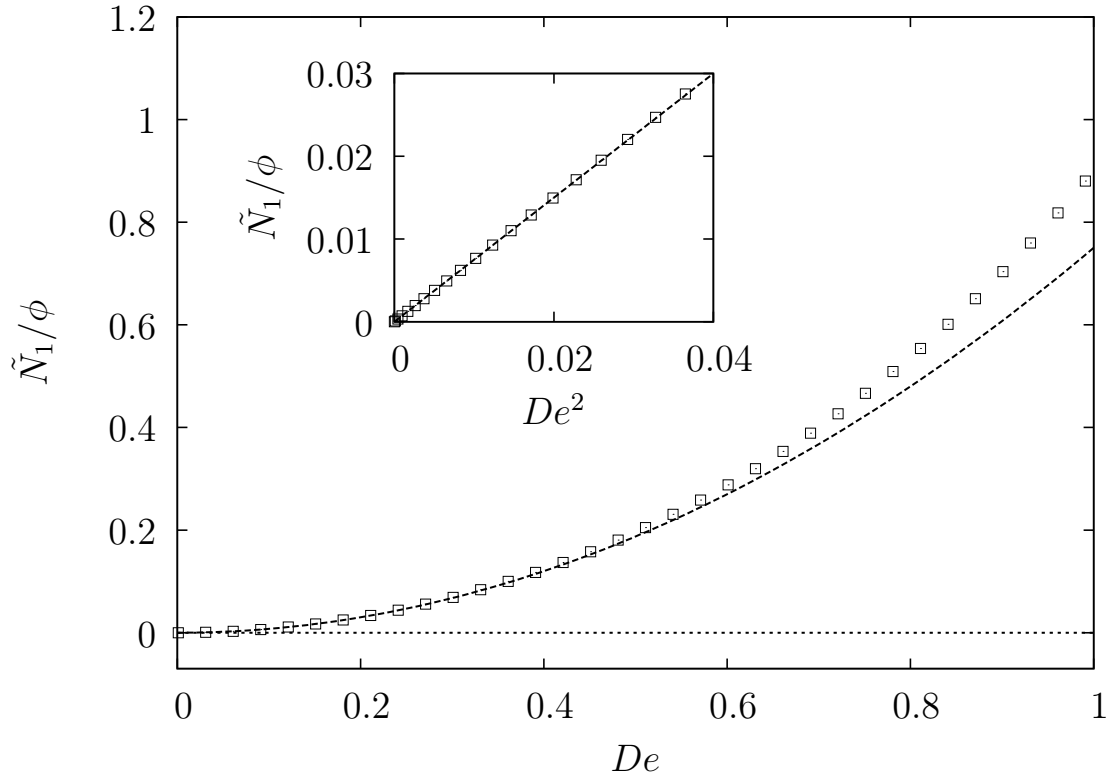


Figura 5.2: Primeira diferença de tensões normais adimensional \tilde{N}_1/ϕ em função de De . Pontos denotados por quadrados abertos representam a solução por integração numérica das equações (4.34) e (4.35) e a linha pontilhada representa a solução analítica dada pela equação (5.9). O encarte mostra a dependência quadrática de \tilde{N}_1/ϕ para $De \rightarrow 0$, i.e., no regime de pequenas deformações. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

5.3.2 O critério da Equivalência de Cox-Merz.

Antes de apresentar uma comparação dos resultados numéricos e medidas experimentais na seção (5.3.3), é apresentado nesta seção o importante critério de Cox-Merz [17],[8]. O critério estabelece uma relação entre o módulo viscoso $\eta'(\omega)$ e a viscosidade do fluido η . Esta regra tem origem nos princípios de equivalência entre o cisalhamento permanente e oscilatório em regimes de visco-elasticidade em baixas frequências. O critério prediz que a viscosidade aparente η de líquidos é equivalente à magnitude da viscosidade complexa $|\eta^*(\omega)|$ para valores correspondentes de baixas frequências ω e taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$.

$$\eta(\dot{\gamma}) = |\eta^*(\omega)| \Big|_{\omega=\dot{\gamma}} = \eta'(\omega) \left(1 + \sqrt{\frac{\eta''(\omega)}{\eta'(\omega)}} \right)_{\omega=\dot{\gamma}}^2. \quad (5.11)$$

Porém esta regra mostra-se adequada somente no regime de viscoelasticidade linear [51], já que o princípio da equivalência entre os escoamentos falha em regimes não-lineares.

O critério de Cox-Merz também se aplica às propriedades elásticas das suspensões poliméricas. Neste caso, relaciona o módulo elástico $G'(\omega)$, obtido do cisalhamento oscilatório de pequena amplitude, com a primeira diferença de tensões normais N_1 , obtida dos ensaios em regime de cisalhamento permanente (cisalhamento simples). O critério estabelece que:

$$G'(\omega) = \frac{N_1(\dot{\gamma})}{2}. \quad (5.12)$$

No presente trabalho fez-se necessário a aplicação do critério de Cox-Merz. Exemplos do uso do referido critério são mostrados na figura (5.3) em que apresenta-se três gráficos de propriedades viscosas e elásticas para três tipos distintos de suspensões poliméricas. O critério de equivalência de Cox-Merz é apresentado com os resultados apresentados na figura (5.3) pois pode-se ver uma excelente concordância entre η e $|\eta^*|$. No entanto, a equivalência entre $N_1/2$ e G' , dado na equação (5.12), mostra-se mais sensível à frequência de excitação. Em baixas frequências (ou taxas de cisalhamento), o critério de equivalência é verificado para todas as suspensões examinadas. É importante notar que conforme aumenta-se a frequência, $N_1/2$ passa a apresentar uma discrepância maior com relação a G' em comparação a frequências menores para a solução correspondente ao gráfico (5.3)(a) do que as respectivas soluções para os gráficos (5.3)(b) e (5.3)(c).

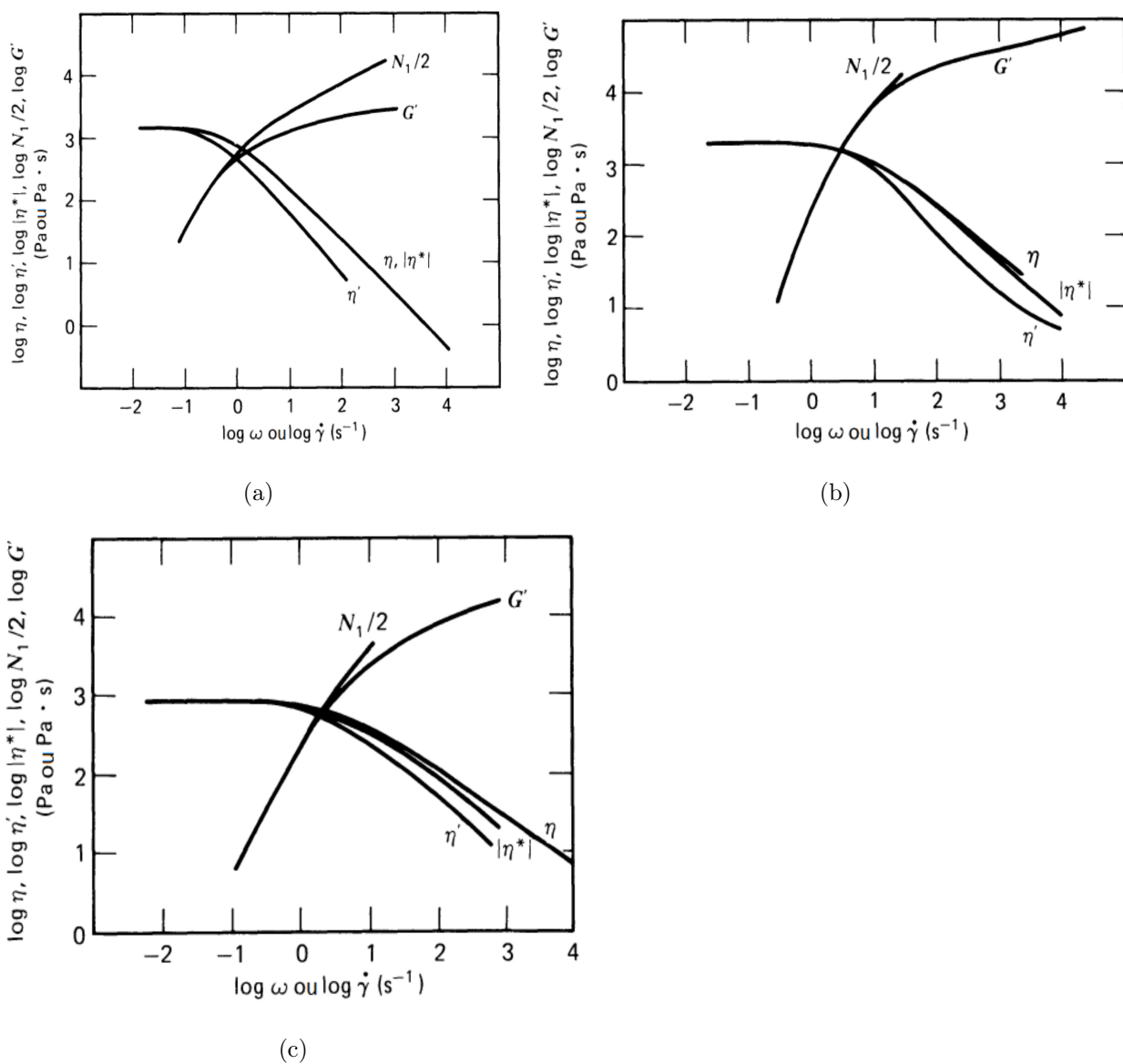


Figura 5.3: Comparação das propriedades viscosas $\eta'(\dot{\gamma})$ e $\eta'(\omega)$ e elásticas $N_1(\dot{\gamma})/2$ e $G'(\omega)$ para diferentes suspensões de poliestireno em 1-cloronaftaleno. Também é mostrada a magnitude da viscosidade complexa η^* , que deve ser igual a η de acordo com o critério de equivalência de Cox-Merz. (a) Poliestireno linear 0.15 g/ml, (b) Poliestireno ramificado 0.45 g/ml e (c) Poliestireno Styron 0.42 g/ml. Fonte: Yasuda et al., 1981 [65].

5.3.3 Comparação entre resultados Numéricos e Experimentais para a diferença de tensões normais N_1

Nesta seção apresenta-se um importante resultado no que diz respeito à validação e calibração do presente modelo teórico com base em medidas experimentais. Para este fim considere a tabela (5.2) com os dados experimentais, já de forma adimensional, para os valores da primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 com relação ao parâmetro De^2 , para uma suspensão de PAMA a concentração de $\phi = 400 ppm$. Estes dados foram obtidos [51] em um cisalhamento oscilatório simples utilizando-se o reômetro que se encontra instalado no laboratório de microhidrodinâmica e reologia do Grupo do Vortex/UnB. Grupo este no qual a presente tese foi desenvolvida. Os valores de N_1 (dimensionais) foram obtidos por meio do critério de equivalência de Cox-Mertz, descrita na seção (5.3.2). Aqui vale destacar que foi utilizada a relação dada pela equação (5.12), para o levantamento da diferença de tensões normais N_1 .

A tabela (5.2) apresenta os resultados das medidas de \tilde{N}_1 experimentais. Garantiu-se sempre que $\dot{\gamma} \ll 1 s^{-1}$, ou de outro modo equivalente, $De \ll 1$. As corridas experimentais foram realizadas com um controle rigoroso da temperatura, mantendo-se constante a $20^\circ C$. Foi determinado o tempo de relaxação principal da suspensão polimérica de PAMA a $\phi = 400 ppm$ como sendo $\tau_p = 0.01204 s$. O fluido base utilizado como solvente foi a água destilada, que a esta temperatura dos ensaios possui viscosidade de $\mu_w = 1.002 \times 10^{-3} Pa.s$. A adimensionalização dos dados experimentais foi feita de modo análogo ao numérico, isto é, $\tilde{N}_1 = N_1 \tau_p / \mu_w$ e o número de Deborah foi determinado, também como no caso numérico, da forma $De = \tau_p \dot{\gamma}$. A primeira linha da tabela (5.2) trata-se apenas de uma condição de equilíbrio do problema sem a presença do escoamento, uma vez que, para $De = \tau_0 \dot{\gamma} = 0$, não se tem o campo de velocidade, como pode ser visto na equação (5.3).

Tabela 5.2: Valores experimentais da primeira diferença de tensão normal adimensional \tilde{N}_1 e respectivos valores de De^2 de uma suspensão diluída de PAMA para $\phi = 400 \text{ ppm}$.

| De^2 | \tilde{N}_1 | Erro experimental de \tilde{N}_1 |
|----------|---------------|------------------------------------|
| 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 1.05E-06 | 1.48E-02 | 1.69E-02 |
| 4.54E-06 | 7.67E-02 | 7.41E-03 |
| 6.86E-06 | 1.12E-01 | 1.09E-02 |
| 1.05E-05 | 1.48E-01 | 1.69E-02 |

Experimentalmente foi verificado também a dependência quadrática em baixos De , i.e., $\tilde{N}_1(De) = K De^2$, conforme descrito na solução assintótica dada pela equação (5.9). O coeficiente K é um parâmetro de ajuste a partir dos dados experimentais conforme tabela (5.2), o qual é determinado como sendo $K = 15500$. Em seguida, para a calibração, considera-se a equivalência entre este parâmetro K e o coeficiente $(3/4)\phi$ da equação (5.9), com a adição de uma constante de calibração, q , entre os dados teóricos e experimentais e desse modo escreve-se:

$$\frac{3}{4}\phi q = K = 15500, \quad (5.13)$$

de onde conclui-se que $q \approx 5.17 \times 10^7$. Perceba-se que o valor para a constante de calibração foi alto. Arguimos que este alto valor se deve a baixa concentração ou regime diluído considerado ($\phi = 400 \text{ ppm} = 4 \times 10^{-4}$) e a aplicação de baixo número de De , requerido para o critério de equivalência de Cox-Merz. Diante do valor da constante de calibração q , ajusta-se o código numérico do seguinte modo: Como $N_1 = \sigma_{11} - \sigma_{22}$, então multiplica-se toda a parte elástica da equação (4.34) por q , e assim obtém-se novos valores para $\tilde{N}_1(De)$.

O resultado desta comparação, entre as soluções teórica e experimental, pode ser vista na figura (5.4). Este resultado remete a uma das principais contribuições da presente tese pois mesmo em regimes diluídos obter medidas experimentais para N_1 , por exemplo, se tornam consideravelmente difíceis para altos regimes de De tanto para escoamentos cisalhamentos permanentes quanto transientes. Nota-se uma boa concordância entre as medidas experimentais e teóricas (numérico e assintótico), para uma faixa do parâmetro $De \lll 1$. No entanto, perceba-se que mesmo para De muito pequeno, observa-se que a

medida experimental já difere das soluções numérica e assintótica. Isto se deve a limitação do critério de equivalência de Cox-Merz, onde $N_1 = 2G'$ restrito para $\omega \rightarrow 0$ ou $De \rightarrow 0$. Portanto, o regime de baixas frequências dos experimentos para utilizar o critério de Cox-Merz é limitado a valores muito pequenos do parâmetro De .

Afim de se determinar no limite assintótico onde verifica-se um desvio entre a solução numérica e os dados experimentais, mesmo com a adição da constante de calibração q , construiu-se a tabela (5.3). Na referida tabela, verifica-se que o erro relativo entre essas duas soluções é maior do que um por cento para $De \approx 0.25$. De fato para $De \approx 0.25$, o escoamento já produz um estiramento considerável nas macromoléculas de onde já se nota efeitos elásticos não-lineares mais intensos e deste modo o limite assintótico (eq. (5.9)) não é mais válido. Em outras palavras, a dependência quadrática de \tilde{N}_1 com De precisa ser corrigida, passando agora o \tilde{N}_1 a depender de termos de altas ordens em De , i.e., $\mathcal{O}(De^4)$ e $\mathcal{O}(De^6)$ [4]. Nota-se, finalmente, que o modelo fornecido pelas equações (4.34) e (4.35) permite variar mais o parâmetro De antes de se deixar o limite assintótico, do que a técnica experimental realizada que nos permitiu gerar a figura (5.4) abaixo.

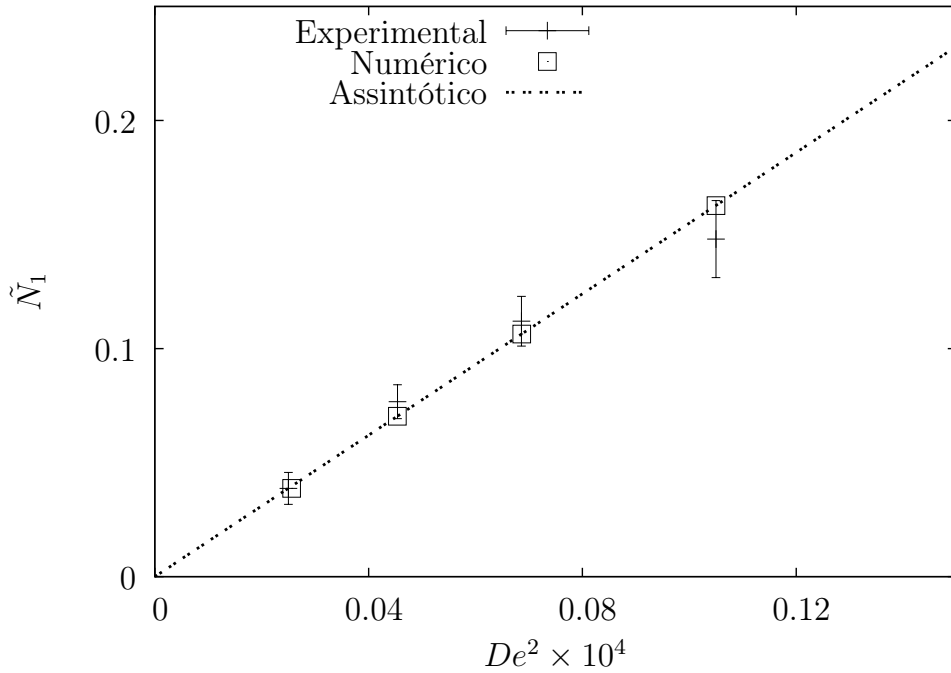


Figura 5.4: Solução numérica, analítica e medidas experimentais adimensionais da primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 , para uma suspensão de PAMA a concentração de $\phi = 400 \text{ ppm}$. Parâmetro: $L = 60$.

Tabela 5.3: Solução numérica da primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 , solução assintótica $\tilde{N}_1 = 15500De^2$ e o erro relativo entre ambas.

| De | \tilde{N}_1 | $15500De^2$ | Erro Relativo: $(\tilde{N}_1 - 15500De^2)/15500De^2$ |
|----------|---------------|-------------|--|
| 1.00E-3 | 1.550E-2 | 1.550E-2 | 3.702E-4 |
| 5.49E-2 | 46.791 | 46.785 | 1.323E-4 |
| 10.40E-2 | 169.136 | 168.891 | 1.446E-3 |
| 15.30E-2 | 368.101 | 366.788 | 3.584E-3 |
| 20.32E-2 | 644.670 | 640.471 | 6.555E-3 |
| 24.82E-2 | 964.585 | 955.042 | 9.992E-3 |
| 25.27E-2 | 1000.215 | 989.945 | 1.038E-2 |

5.3.4 Resultado numérico-experimental da medição da viscosidade de uma suspensão de PAMA.

Nesta seção, apresenta-se uma comparação e verificação entre resultados experimentais e numéricos, ambos adimensionais, da viscosidade de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 ppm$. As medidas experimentais já foram apresentados na figura (3.9). Neste momento, o maior interesse é verificar como a viscosidade adimensional da suspensão polimérica, $\tilde{\mu}_s = \mu(\dot{\gamma})/\mu_w$, varia em função do parâmetro De . No presente trabalho $De = \tau_p \dot{\gamma}$, e sendo $\tau_p = 0.01204 s$ para uma suspensão de PAMA a $\phi = 400 ppm$, obtém-se uma nova escala de variação no eixo x da figura (3.9) agora em função de De . É preciso considerar também o modelo de Cross na forma adimensional em função do número de De com os valores dos coeficientes de ajuste determinados na figura (3.9), deste modo obtém-se:

$$\tilde{\mu}_s(De) = \frac{\mu_s(De)}{\mu_w} = \frac{\tilde{\mu}_0 + \tilde{\mu}_\infty (KDe)^m}{1 + (KDe)^m}, \quad (5.14)$$

em que: $\mu_w = 1.002 cP$ é a viscosidade da água, $\tilde{\mu}_0 = \mu_0/\mu_w = 314.47$, $\tilde{\mu}_\infty = \mu_\infty/\mu_w = 1.07$, $K = k/\tau_p = 35.37$.

Feitas as considerações acima, volta-se a atenção ao caso numérico. Considerando a definição da viscosidade, tem-se que: $\mu_s(\dot{\gamma}) = \sigma_{12}/\dot{\gamma}$ (dimensional) e em termos adimensio-

nais segundo as escalas já definidas, tem-se que: $\tilde{\mu}_s(De) = \tilde{\sigma}_{12}/De$ (adimensional). Desta maneira é preciso analisar agora a componente $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ do tensor de tensões $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$. Da equação adimensional (4.34), pode-se escrever $\tilde{\sigma}_{12}$ na forma adimensional,

$$\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t}) = De \tilde{\mu}_s(De) + \frac{9}{2} \phi f(R) \tilde{B}_{12}(\tilde{t}). \quad (5.15)$$

Aqui $\tilde{\mu}_s(De)$ é dado como na equação (5.14) com os coeficientes de ajuste lá determinados das medidas experimentais. Em seguida, resolve-se a equação (5.15) por integração numérica afim de se obter os valores da viscosidade adimensional $\tilde{\mu}_s(De) = \tilde{\sigma}_{12}/De$.

Na figura (5.5) apresenta-se uma comparação entre os resultados da simulação numérica e as medidas experimentais, ambos agora em função do parâmetro De . É importante notar que existe uma ótima concordância entre os resultados numéricos e experimentais, conforme mostrado na figura (5.5). Como na figura (3.9), vê-se o comportamento pseudoplástico, no qual um aumento do valor do parâmetro De ocasiona uma diminuição da viscosidade. Em adição, para pequenos valores de De a viscosidade fica praticamente inalterada, correspondendo a um platô Newtoniano já que estabelece-se um regime muito próximo do equilíbrio no qual a macromolécula não responde ao escoamento aplicado.

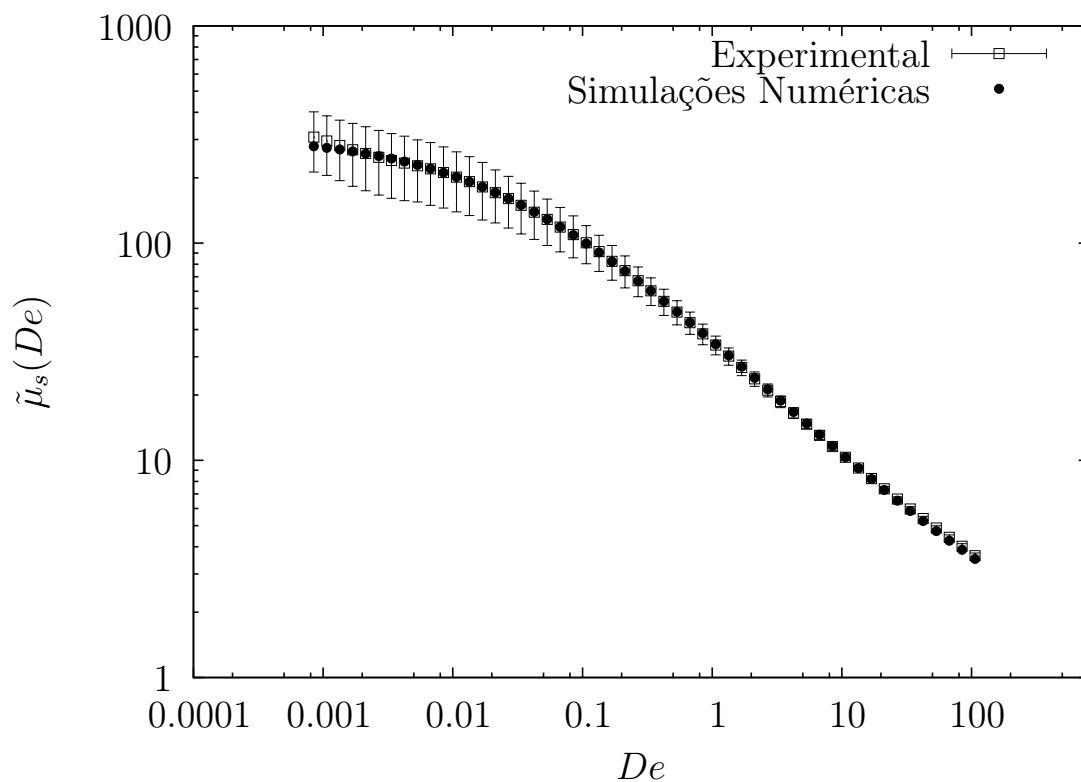


Figura 5.5: Comparação entre os resultados numéricos e medidas experimentais da medição da viscosidade de uma suspensão de PAMA a $\phi = 400 \text{ ppm}$, em função de De . Os dados das simulações numéricas estão representados nos círculos cheios. As medidas experimentais estão representadas nos quadrados abertos. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

5.4 Função $\Phi(s)$ para um escoamento do tipo impulso de deformação

Nesta seção apresenta-se o resultado da função relaxação de tensão $\Phi(s)$ obtida para o caso numérico, de um escoamento do tipo impulso de deformação. Primeiramente vale recordar do campo de velocidade. Como descrito⁵ na seção (2.10), o mesmo é dado por:

$$\mathbf{u}(t) = (\dot{\gamma}(t)x_2, 0, 0), \quad (5.16)$$

com $\dot{\gamma}(t) = \gamma_0 \vartheta(t - t_0)$ e a função $\vartheta(t - t_0)$ dada⁶ por

$$\vartheta(t - t_0) = \begin{cases} \frac{1}{dt}, & t_0 \leq t \leq t_0 + dt; \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases} \quad (5.17)$$

Para a adimensionalização deste campo de velocidade, considera-se $u_c = a/\tau_p$ como sendo uma velocidade característica do escoamento. Deste modo obtém-se:

$$\tilde{\mathbf{u}}(\tilde{t}) = \frac{\mathbf{u}(t)}{u_c} = \left(\tilde{x}_2 \gamma_0 \frac{\tau_p}{dt}, 0, 0 \right) = (De \tilde{x}_2, 0, 0), \quad \text{para } t_0 \leq t \leq t_0 + dt, \quad (5.18)$$

em que o número de Deborah é dado, agora, por $De = \gamma_0 \delta t^*$, com $\delta t^* = \tau_p/dt$. É importante notar que quando $t \notin [t_0, t_0 + dt]$, então, tem-se $\tilde{\mathbf{u}}(\tilde{t}) = \mathbf{0}$. Percebe-se então que o referido campo de velocidade é semelhante ao caso do cisalhamento simples visto na seção (5.3), onde no caso de um impulso de deformação a aplicação da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ é num curto intervalo de tempo, denotado por dt .

Como visto na seção (3.3.3), experimentalmente o que se faz é aplicar a taxa de cisalhamento num curto espaço de tempo $dt \ll 1$ s, interrompendo-a na sequência e observando-se como a tensão de cisalhamento $\sigma(t)$ relaxa no tempo $t > t_0 + dt$. A função relaxação de tensão é então obtida por meio da equação (2.169) com $\dot{\gamma}$ dada pela função (2.168).

No caso numérico, o procedimento é aplicar a taxa de cisalhamento adimensional De também num curto espaço de tempo adimensional $d\tilde{t} \ll 1$ e observar como a tensão de cisalhamento $\tilde{\sigma}_{12}$ relaxa no tempo. Como sempre usou-se dos pares de equações governantes exploradas neste trabalho,

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\tilde{\mu}_s(De)\tilde{\mathbf{D}} + \frac{9\phi}{2} f(R)\tilde{\mathbf{B}}, \quad (5.19)$$

⁵Aqui o dt tem o papel do ε na seção (2.10).

⁶Recomenda-se consultar novamente a figura (2.8).

e

$$\frac{d\tilde{\mathbf{B}}}{d\tilde{t}} = \tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}} \cdot (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2f(R)}{\sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}} \left(\tilde{\mathbf{B}} - \frac{1}{3}\mathbf{I} \right), \quad (5.20)$$

com o campo de velocidade descrito na equação (5.18). Em especial determinou-se a solução da componente \tilde{B}_{12} e em seguida de $\tilde{\sigma}_{12}$.

A figura (5.6) mostra o comportamento da função relaxação de tensão adimensional⁷ $\tilde{\Phi}$ obtida para o escoamento por impulso de deformação, bem como o ajuste exponencial de um fluido de Maxwell com apenas um tempo de relaxação adimensional, $\tilde{\alpha}_1 = 0.4998$. Perceba-se que no gráfico da figura (6.21) tem-se uma variação maior de $\tilde{\Phi}$ nas vizinhanças de zero do que na figura (5.6), arguimos que este fato ocorreu devido a se usar $\tilde{\omega} = 1$ na figura (6.21) e na figura (5.6) tem-se $\tilde{\omega} = 0$. Veja no entanto que o tempo adimensional $\tilde{\alpha}_1$ obtido no gráfico (6.21) foi igual a 0.4923 donde se conclui que temos uma diferença menor que um por cento entre os tempos adimensionais $\tilde{\alpha}_1$ da figura (6.21) e o da figura (5.6). Ademais nota-se uma boa concordância qualitativa entre estas duas figuras.

Do resultado numérico obtido nessa seção com impulso de deformação conclui-se que o modelo de fluido elástico usado para a integração numérica das equações governantes reproduz, ao menos qualitativamente, a função relaxação de tensão Φ obtida por meio de medidas experimentais conforme figura (3.12).

⁷Aqui usou-se a mesma adimensionalização quando na determinação de $\tilde{\Phi}$ no caso do escoamento do cisalhamento oscilatório simples.

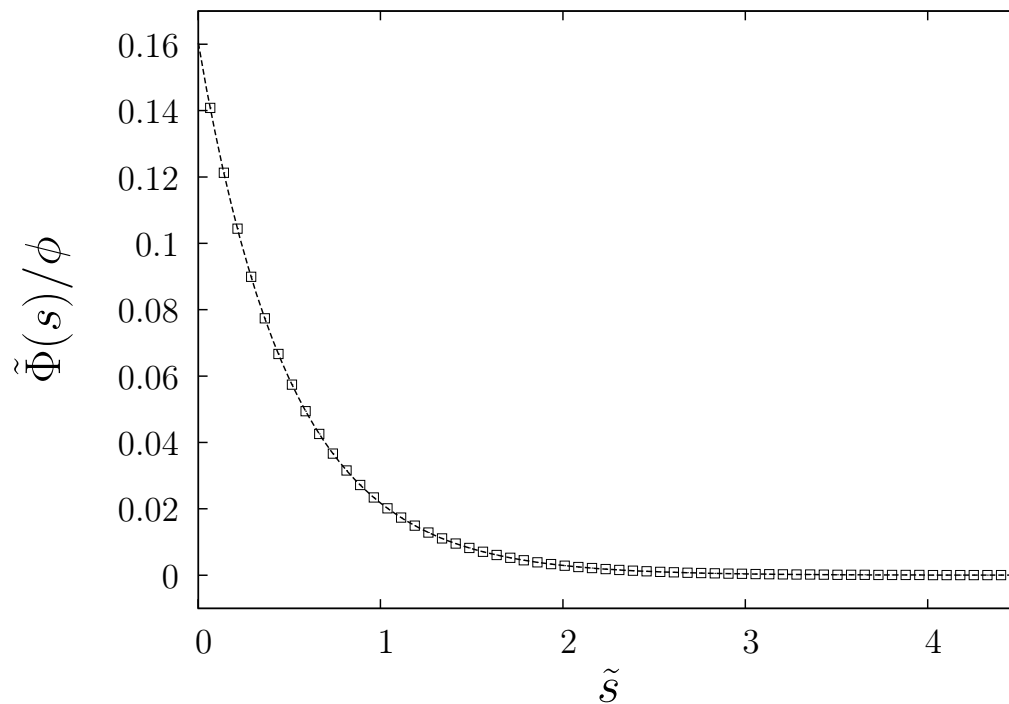


Figura 5.6: Função relaxação de tensão adimensional $\tilde{\Phi}/\phi$ para o escoamento por impulso de deformação. Os quadrados abertos denotam a solução numérica da função $\tilde{\Phi}(\tilde{s})$. Na linha pontilhada tem-se o ajuste feito pelo modelo de viscoelasticidade linear de Maxwell dado por $\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \frac{\tilde{\eta}_1}{\tilde{\alpha}_1} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_1)$, em que: $\tilde{\eta}_1 = 0.0804$ e $\tilde{\alpha}_1 = 0.4998$. Parâmetros: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

5.5 Escoamento Extensional Permanente

A presente seção trata do estudo do escoamento extensional permanente onde apresenta-se⁸ os resultados: viscosidade extensional μ_e e do parâmetro $R = \sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}$ ambos em função do tempo adimensional \tilde{t} e do parâmetro De .

A viscosidade extensional é uma medida da resistência de um fluido a ser deformado na direção das componentes principais de um escoamento permanente extensional ou hiperbólico [8]. Conforme apresentado anteriormente, na seção (2.9), este escoamento possui o seguinte campo de velocidade:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \left(\dot{\epsilon}x_1, -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}x_2, -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}x_3 \right), \quad (5.21)$$

em que $\dot{\epsilon}$ é a taxa de estiramento ou deformação extensional, medida em s^{-1} . Para a adimensionalização deste campo de velocidade usa-se, novamente, $u_c = a/\tau_p$ como velocidade típica do escoamento e o número de Deborah agora será escrito na forma $De = \dot{\epsilon}\tau_p$. Portanto,

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{u_c} = \left(De \tilde{x}_1, -\frac{De}{2} \tilde{x}_2, -\frac{De}{2} \tilde{x}_3 \right). \quad (5.22)$$

O gradiente de velocidade adimensional será um tensor simétrico e deste modo pode-se escrever:

$$\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T = \tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} De & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{De}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{De}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

Como mencionado na seção (2.9) a principal medida reológica deste tipo de escoamento é a viscosidade extensional⁹ definida como:

$$\mu_e = \mu_e(\dot{\epsilon}) = \frac{2\sigma_{11} - \sigma_{22} - \sigma_{33}}{6\dot{\epsilon}}, \quad (5.24)$$

que adimensionalizada pela escala de tensão característica, $\sigma_c = \mu\dot{\epsilon}$, obtém-se:

$$\tilde{\mu}_e = \frac{\mu_e}{\mu} = \frac{2\tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22} - \tilde{\sigma}_{33}}{6}. \quad (5.25)$$

⁸Na verdade parte desse estudo já foi apresentado no trabalho [2]. No entanto há uma nova proposta de adimensionalização das equações (4.31) e (4.32) e por este motivo exploramos novamente tais resultados.

⁹O nome viscosidade extensional faz sentido porque a relaxação da macromolécula inibe a taxa de alongação do fluido como um todo.

No início desta seção mostra-se como se comporta a viscosidade extensional adimensional, nos regimes elástico e anisotrópico. Ressalta-se que será usado o modelo de fluido equivalente de Einstein para a viscosidade cisalhante adimensional do termo da equação adimensional da tensão $\tilde{\sigma}$ (eq.(4.34)). Neste caso $\tilde{\mu}(\phi) = 1 + c\phi$. Logo a equação constitutiva do tensor de tensões é representada por:

$$\tilde{\sigma} = 2\tilde{\mu}_s(\phi)\tilde{\mathbf{D}} + \frac{9}{2}\phi f(R)\tilde{\mathbf{B}}, \quad (5.26)$$

em que $\tilde{\mu}_s(\phi) = 1 + c\phi$, com $c = 1.53 \times 10^5$. Constante esta determinada experimentalmente de acordo com a figura (3.8).

Substituindo a matriz da equação (5.23) na equação (4.35), obtém-se o seguinte sistema geral ($f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$) de equações diferenciais:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -\tilde{B}_{22}De - \frac{2f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{22} - \frac{1}{3} \right); \\ \frac{d\tilde{B}_{33}}{d\tilde{t}} = -\tilde{B}_{33}De - \frac{2f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{33} - \frac{1}{3} \right); \\ \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = 2\tilde{B}_{11}De - \frac{2f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{11} - \frac{1}{3} \right). \end{cases} \quad (5.27)$$

Note que aqui $\tilde{B}_{22} = \tilde{B}_{33}$.

5.5.1 Regime Elástico

Considere agora a viscosidade extensional adimensional, inicialmente para o caso do regime elástico, em que assume-se a hipótese $De \ll 1$. Como no caso do cisalhamento simples tem-se novamente $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$. Dito de outro modo, neste regime assume-se que a macromolécula é pouco estirada pelo escoamento, permanecendo nas vizinhanças de seu estado de equilíbrio randômico. Usando esta hipótese no sistema (5.27), obtém-se agora o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -\tilde{B}_{22}(De + 2) + \frac{2}{3}; \\ \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = 2(De - 1)\tilde{B}_{11} + \frac{2}{3}. \end{cases} \quad (5.28)$$

Considerando apenas a solução para $\tilde{t} > 4$, tem-se as funções $\tilde{B}_{11}(\tilde{t})$ e $\tilde{B}_{22}(\tilde{t})$, dadas por:

$$\tilde{B}_{11}(\tilde{t}) = \frac{1}{3(1 - De)} \quad \text{e} \quad \tilde{B}_{22}(\tilde{t}) = \frac{2}{3(2 + De)}. \quad (5.29)$$

Substituindo a equação (5.29) na equação (5.26), e posteriormente utilizando a equação (5.25), obtém-se após algumas manipulações algébricas a viscosidade extensional adimensional,

$$\tilde{\mu}_e = \frac{\mu_e}{\mu} = De \tilde{\mu}_s(\phi) + \frac{3\phi De}{2(1-De)(2+De)}. \quad (5.30)$$

Neste ponto, vale recordar que na hipótese $0 < De \ll 1$, pode-se usar as seguintes aproximações assintóticas:

$$\frac{1}{1-De} = 1 + De + De^2 + De^3 + \dots \sim 1 + De, \quad (5.31)$$

e

$$\frac{1}{2+De} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1 - \left(-\frac{De}{2}\right)} \right] = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{De}{2} + \frac{De^2}{4} - \dots \right) \sim \frac{1}{2} - \frac{De}{4}. \quad (5.32)$$

Desta maneira reescreve-se a equação (5.30), para $De \ll 1$, na seguinte forma:

$$\tilde{\mu}_e = \frac{\mu_e}{\mu} \sim De \tilde{\mu}_s(\phi) + \frac{3}{2}\phi De(1+De) \left(\frac{1}{2} - \frac{De}{4} \right) \sim De \tilde{\mu}_s(\phi) + \frac{3}{4}\phi De + \mathcal{O}(De^2). \quad (5.33)$$

É importante notar que na equação (5.33) a viscosidade extensional depende explicitamente de ϕ e De e daqui pode-se concluir que para uma suspensão diluída polimérica em que $\phi \ll 1$ e para um escoamento fraco, no qual $De \ll 1$, tem-se que a contribuição não newtoniana de ordem $\mathcal{O}(\phi De)$ pode ser desprezada. Deste modo pode-se afirmar que a viscosidade extensional adimensional é assintoticamente igual a:

$$\tilde{\mu}_e \sim De \tilde{\mu}_s(\phi). \quad (5.34)$$

O lado direito da equação (5.34) pode ser considerado como sendo a viscosidade de cisalhamento modificada, denotada por $\hat{\mu} = \hat{\mu}(De, \phi)$, a qual é definida por:

$$\hat{\mu} = De \tilde{\mu}_s(\phi) = De(1 + c\phi). \quad (5.35)$$

Nota-se ainda, que neste regime elástico os parâmetros dominantes são a fração volumétrica ϕ e o número de De . O parâmetro L , que mede a extensibilidade do polímero, não tem nenhuma contribuição neste regime.

5.5.2 Regime Anisotrópico

No regime anisotrópico considera-se a situação em que o polímero está sujeito a escoamentos intensos, em que $De \approx 1$, de maneira que as macromoléculas do fluido sofrem grandes deformações, de onde pode-se assumir que $R \approx L \gg 1$. Num escoamento extensional unidirecional permanente a macromolécula é estirada, por exemplo, na direção 11. Assim, escoamentos intensos nos quais altos valores de Deborah são considerados, a componente do tensor conformação \tilde{B}_{11} é da ordem de L^2 , enquanto que as outras componentes \tilde{B}_{22} e \tilde{B}_{33} , são da ordem de um ou pode-se considerar $\tilde{B}_{11} \gg \tilde{B}_{22} = \tilde{B}_{33}$. Levando-se em conta esta análise, as seguintes aproximações serão aplicadas [2];

$$R^2 = tr(\tilde{\mathbf{B}}) \approx \tilde{B}_{11} \quad \text{e} \quad \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{B}} = \tilde{\mathbf{B}} \cdot (\tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}})^T \approx \tilde{B}_{11} \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1. \quad (5.36)$$

Aplicando-se esta hipótese na última equação do sistema (5.27) e escrevendo-a em termos de $R = \sqrt{tr(\tilde{\mathbf{B}})}$, conclui-se que:

$$\frac{dR}{d\tilde{t}} = De R - \frac{f(R)}{R^2} \left(R^2 - \frac{1}{3} \right). \quad (5.37)$$

Neste ponto, defini-se o parâmetro R_L como sendo o valor de R ao qual a extensão da macromolécula atinge seu valor máximo, deste modo pode-se escrever:

$$\frac{dR}{d\tilde{t}} = De R_L - \frac{f(R_L)}{R_L^2} \left(R_L^2 - \frac{1}{3} \right) = 0. \quad (5.38)$$

Agora é possível expressar, a partir da equação (5.38), a função $f(R_L)$ em termos de R_L e de De , resultando em:

$$f(R_L) = \frac{3De R_L^3}{(3R_L^2 - 1)}. \quad (5.39)$$

A partir da hipótese de que $\tilde{B}_{11} \sim L^2 \gg \tilde{B}_{22} = \tilde{B}_{33}$, então pode-se mostrar que a componente $\tilde{\sigma}_{11}$ do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ é a dominante com relação as outras componentes. Portanto considera-se apenas $\tilde{\sigma}_{11}$ para o cálculo da viscosidade extensional. Conforme a equação (5.25), determina-se que:

$$\tilde{\mu}_e = \frac{\mu_e}{\mu} \sim \frac{2\tilde{\sigma}_{11}}{6} = \frac{De}{3} \left(2\tilde{\mu}_s(\phi) + \frac{9}{2}\phi f(R_L) R_L^2 \right). \quad (5.40)$$

Substituindo a equação (5.39) na equação (5.40), tem-se finalmente, uma expressão assintótica para a viscosidade extensional adimensional, neste regime anisotrópico, dada por:

$$\tilde{\mu}_e \sim \frac{2De}{3} \tilde{\mu}_s(\phi) + \frac{3}{2}\phi De \frac{R_L^5}{(3R_L^2 - 1)}. \quad (5.41)$$

Na equação (5.41), o limite $R_L \rightarrow L$, leva a $\tilde{\mu}_e \propto \phi L^3$, como proposto por Batchelor na teoria de fibra rígida delgadas [5]. Assim, mesmo na hipótese de $\phi \ll 1$ se tem $\phi L^3 \gg 1$ (o que é fácil de ocorrer já que aqui $L \gg 1$). Portanto a viscosidade extensioanal adimensional pode assumir valores bem significativos. Fisicamente falando, este comportamento ocorre pois a presença das macromoléculas produz um efeito não linear devido à anisotropia produzida pela intensa deformação das macromoléculas [2]. Quando o tempo de relaxação da macromolécula é muito maior que o tempo característico do escoamento as macromoléculas comportam-se praticamente como fibras rígidas.

Por fim considere $R_L = cL$, com $c \approx 1$, na equação (5.38) a fim de inferir sobre o número de Deborah corresponde ao limite assintótico em que $R_L \rightarrow L$. Denote-se este número de Deborah como sendo De_L e usando $f(R) = L^2/(L^2 - R^2)$, após efetuar algumas manipulações algébricas, determina-se:

$$De_L = \frac{3c^2L^2 - 1}{3c^3L^3(1 - c^2)} \sim \frac{3c^2L^2}{3c^3L^3(1 - c^2)} = \frac{1}{cL(1 - c^2)}. \quad (5.42)$$

Na equação (5.42) ao usar $c = 0.99$ e $L = 60 \gg 1$, tem-se que $De_L \approx 0.84 \approx 1$, conforme o regime anisotrópico requer.

Ressalta-se que o comportamento do polímero pode ser caracterizado de maneira aproximada por um modelo de fibras rígidas delgadas [5], na qual a viscosidade extensional é mais dependente da extensibilidade L das macromoléculas do que do número de Deborah, $De \approx 1$. A anisotropia causada pelo estiramento das macromoléculas e o alinhamento das mesmas na direção do escoamento é o principal mecanismo que influencia na reologia do fluido em escoamentos permanentes extensionais. Resultado este que poderia explicar porque a adição de poucos *ppm* de um polímero de alto peso molecular produz mudanças drásticas na queda de pressão em escoamentos turbulentos em canais de tubos, por exemplo. Sugere-se, desta forma que com base nos resultados obtidos, a anisotropia de tensões produzida pelo estiramento das macromoléculas, resultando num aumento significativo da viscosidade extensional, pode ser o fator preponderante em aplicações de redução do fator de atrito em escoamentos turbulentos [18],[2].

Neste ponto do trabalho vale chamar a atenção de um ponto que diz respeito a uma comparação entre como expressar a viscosidade efetiva de uma suspensão polimérica μ_s no modelo de Einstein e no modelo de fibras rígidas. Sabe-se que o aumento da viscosidade

efetiva μ_s da suspensão polimérica pode ainda ser calculado, de um modo geral no modelo de fibras rígidas [5], em termos da razão de aspecto L/a que mede a anisotropia da fibra como sendo:

$$\mu n L^3 = \mu \frac{\phi}{\pi} \left(\frac{L}{a}\right)^2 = \underbrace{\mu \frac{1}{\pi} \left(\frac{L}{a}\right)^2}_{\phi}, \quad (5.43)$$

em que μ é a viscosidade do fluido base e $n = \phi/v_p$ é o número de densidade de partículas onde agora¹⁰ $v_p = \pi a^2 L$ é o volume de uma macromolécula estirada, que deve ser imaginada como um “cilindro” ou uma fibra rígida. Note ainda que o raio deste cilindro é supostamente assumido como sendo igual a distância de equilíbrio a , conforme visto na seção (2.2).

No entanto tem-se ainda que: $\mu_s = \mu(1 + c\phi)$, do modelo de Einstein, donde se vê que o aumento da viscosidade efetiva aqui é dado pelo fator $\mu c\phi$. Comparado a viscosidade efetiva de Einstein com a equação (5.43), pode-se escrever:

$$c = \frac{1}{\pi} \left(\frac{L}{a}\right)^2. \quad (5.44)$$

Logo, é possível comparar o coeficiente c do regime de Einstein com a razão de anisotropia das macromoléculas L/a . Por exemplo, foi determinado experimentalmente para a PAMA, na figura (3.8), que $c = 1.53 \times 10^5$. Assim, usando a equação (5.44) estima-se que $L/a \sim 100 \gg 1$. O que é um valor bastante razoável para a PAMA visto que a mesma possui massa molar em torno de 10^6 g/mol. Destaca-se da presente análise a possibilidade de se escrever $\mu_s(\phi, L/a)$ como sendo:

$$\mu_s(\phi, L/a) = \mu \left[1 + \frac{1}{\pi} \left(\frac{L}{a}\right)^2 \phi \right]. \quad (5.45)$$

Portanto além dos modelos de Einstein e de Cross já usados neste trabalho, pode-se ter ainda μ_s escrita em função de ϕ e da razão de aspecto das macromoléculas L/a .

5.5.3 Resultados da solução numérica da viscosidade extensional e do parâmetro $R^2 = tr(\tilde{\mathbf{B}})$

A presente seção trata de apresentar os resultados das soluções numéricas do par de equações governantes (4.34) e (4.35), destacando-se a viscosidade extensional adimensional e o parâmetro $R^2 = tr(\tilde{\mathbf{B}})$. Aqui a solução foi obtida por meio do método de Runge-Kutta

¹⁰Na seção (2.2) v_p foi assumido como o volume de uma esfera.

de quarta ordem por meio das equações do sistema (5.27) e posterior uso das equações (5.26) e (5.25), no caso, para o cálculo da viscosidade extensional. A figura (5.7) mostra a viscosidade extensional adimensional relativa, $\tilde{\mu}_e - \hat{\mu}$, em função do tempo adimensional. Na referida figura foram simulados vários valores de Deborah para uma extensibilidade típica $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$. É válido notar que a viscosidade extensional atinge um regime constante para todos os valores de Deborah simulados, o que pode ser constatado nos patamares da referida figura. A figura (5.7) mostra ainda que para o valor de $De = 0.65$ (regime anisotrópico) a viscosidade extensional é aproximadamente 10^6 vezes maior que no caso onde $De = 0.35$.

Já no encarte da figura (5.7) tem-se o comportamento da viscosidade extensional relativa para pequenos valores de Deborah. Neste regime observa-se que a viscosidade é pouco alterada uma vez que o polímero não responde com uma tensão significativa, pois as macromoléculas não estão deformadas como no regime anisotrópico. O resultado é semelhante ao resultado assintótico no qual se vê que a contribuição não-newtoniana do polímero na viscosidade extensional é da ordem de ϕDe para $R \approx 1 \ll L$ e como sempre $\phi \ll 1$. Desta maneira, tem-se que somente quando as macromoléculas da suspensão polimérica sofrem deformações expressíveis pelo escoamento é notado a presença de efeitos não-newtonianos no escoamento.

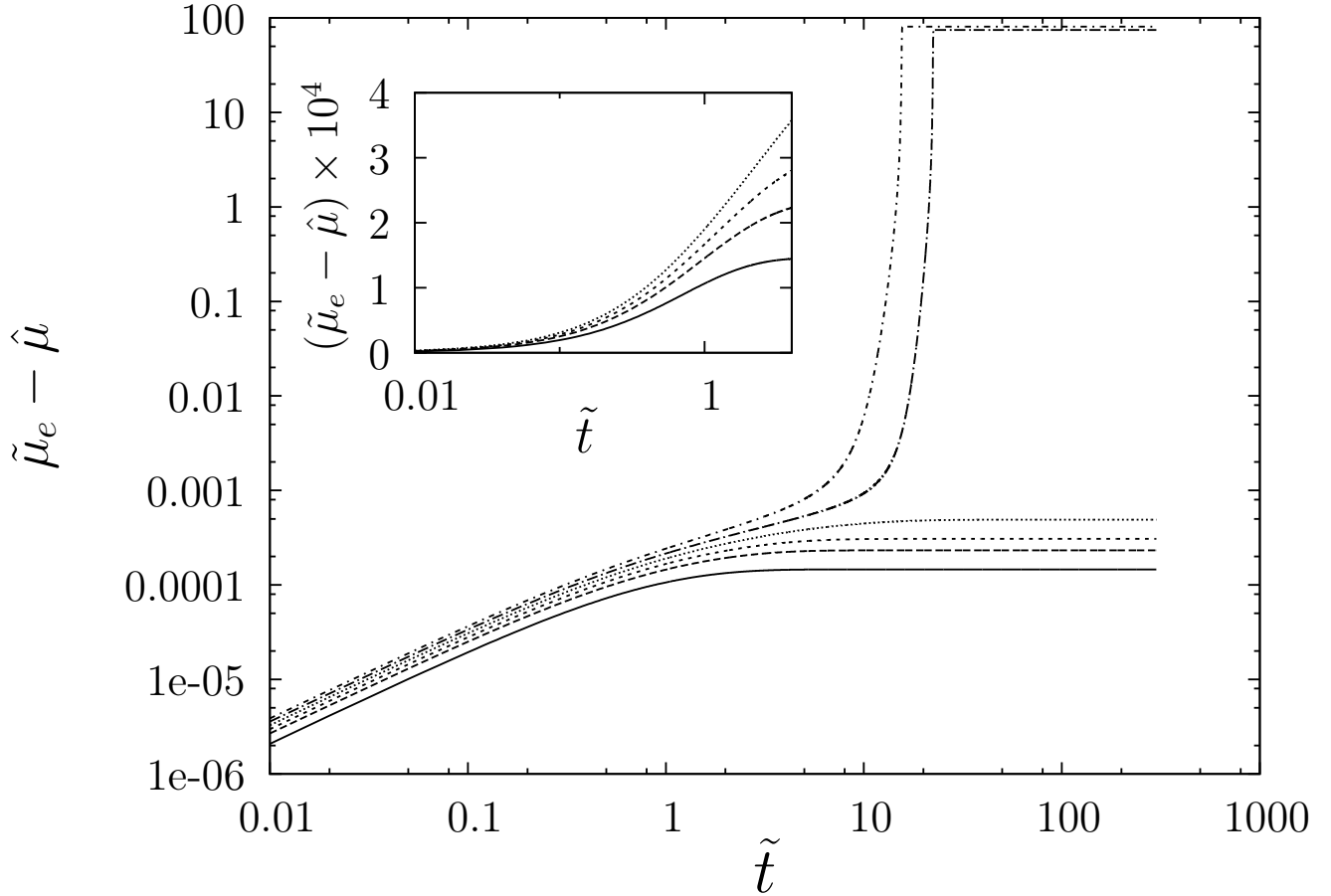


Figura 5.7: Viscosidade extensional adimensional relativa, $\tilde{\mu}_e - \hat{\mu}$, em função do tempo adimensional \tilde{t} . No gráfico tem-se, de baixo para cima, em ordem crescente, os seguintes valores para o número de Deborah: $De = 0.35; 0.45; 0.50; 0.55; 0.60; 0.65$. No encarte a viscosidade extensional adimensional relativa foi multiplicada por um fator de 10^5 , para uma melhor interpretação do resultado quando \tilde{t} varia no intervalo $[10^{-2}, 4]$. Ainda no encarte tem-se, de baixo para cima, os valores de $De = 0.35; 0.45; 0.50; 0.55$. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

Na figura (5.8) tem-se a viscosidade extensional adimensional relativa em função do número de Deborah, para diferentes valores do parâmetro L e $\phi = 400 \text{ ppm}$. Verifica-se que a viscosidade extensional é dependente de De , porém varia muito pouco para $De < 0.5$, e até este ponto o parâmetro de anisotropia L não é relevante visto que $\tilde{\mu}_e - \hat{\mu}$ não varia. Perceba, porém, que a partir de $De \approx 0.55$ a viscosidade extensional passa a variar rapidamente com o parâmetro L , como predito pela equação (5.41) do regime assintótico anisotrópico. Para $De \approx 0.6$ observa-se um salto considerável na viscosidade extensional e neste caso o parâmetro anisotrópico domina efeitos de relaxação. Nesse caso a macromolécula pode ser interpretada como sendo uma estrutura de fibra rígida alinhadas na direção do escoamento. Em polímeros de alto peso molecular o tempo de relaxação da macromolécula é muito maior que o tempo característico do escoamento e que as macromoléculas não relaxam para De mais altos. Note que para pequenos valores de L (polímeros de baixo peso molecular) o regime anisotrópico é gradualmente alcançado e para polímeros de altos pesos moleculares, isto é, para maiores valores de L , a viscosidade extensional salta de valores de ordem 10^{-3} para valores da ordem de 10, i.e., 10^4 vezes maior quando $De > 0.6 \approx 1$.

No encarte da figura (5.8) tem-se a comparação entre a solução numérica para o caso em que $L = 35$ e a solução assintótica, dada pela equação (5.33), para a viscosidade extensional adimensional relativa, i.e., no caso do regime elástico para $De \ll 1$, e

$$\tilde{\mu}_e - \hat{\mu} = \frac{3}{4}\phi De. \quad (5.46)$$

Ainda com relação ao encarte da figura (5.8) vê-se uma boa comparação entre essas duas soluções para $De < 0.1$ e que o desvio entre as soluções numérica e assintótica pode ser determinado a partir deste ponto. A solução na figura (5.8) indicam uma ruptura na microestrutura do fluido. Nesta região o par de equações governantes não tem condições de capturar a dinâmica do comportamento do fluido. Assim, associamos essas soluções em altos De com o limite de extensibilidade máxima da macromolécula, levando a um valor máximo da viscosidade extensional.

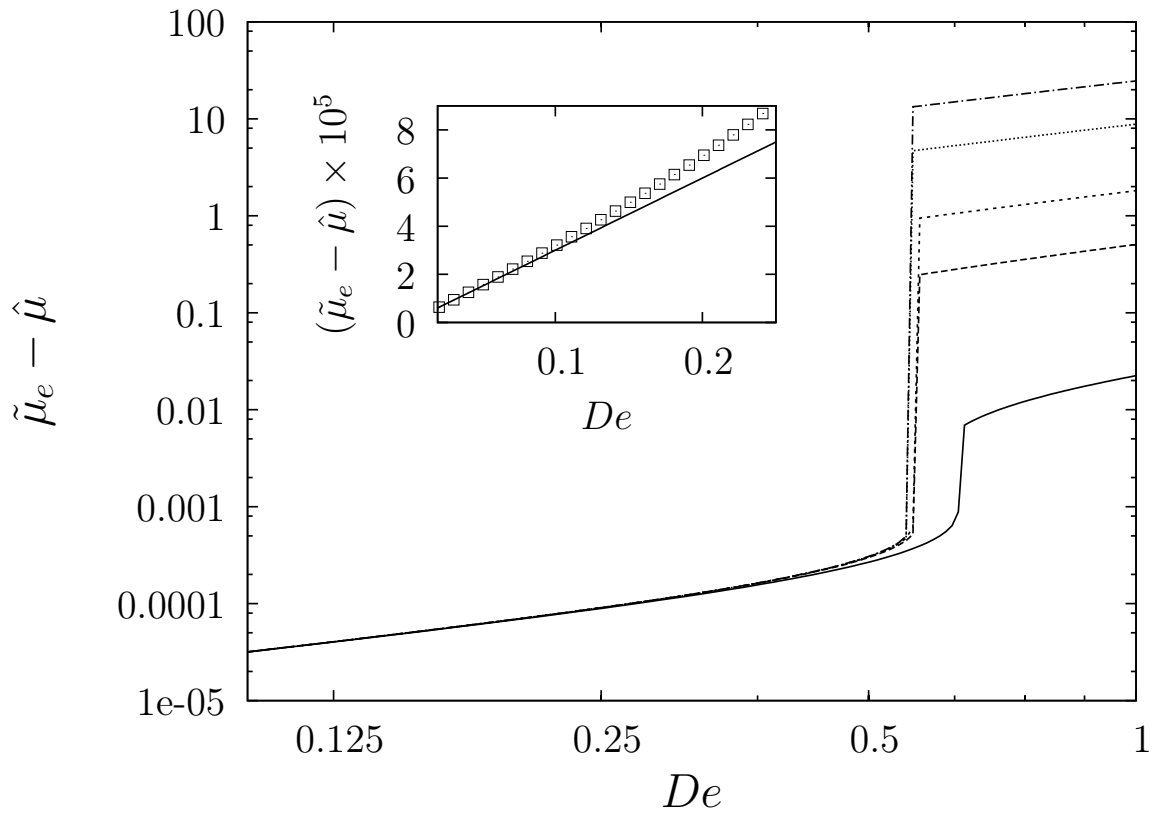


Figura 5.8: Viscosidade extensional relativa $\tilde{\mu}_e - \hat{\mu}$ em função do número de Deborah para diferentes valores do parâmetro L . Na figura, de baixo para cima, tem-se: $L = 4, 10, 15, 25, 35$. No encarte tem-se a solução analítica (linha contínua) dada pela equação (5.46) e a solução numérica nos quadrados abertos para $L = 35$. Parâmetro: $\phi = 400 \text{ ppm}$.

Na figura (5.9) tem-se a variação do comprimento $R = \sqrt{tr(\tilde{\mathbf{B}})} = \sqrt{\tilde{B}_{11} + 2\tilde{B}_{22}}$ em função do tempo adimensional \tilde{t} para $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$. A solução numérica de R foi obtida do sistema (5.27). Nota-se que sempre se têm valores para \tilde{t} em que R atinge um patamar para todos os valores de De simulados. Como tem-se $R = r/a$ inquire-se que a partir destes pontos \tilde{t} , nosso código numérico não mais recupera a física do fenômeno aqui analisado. Novamente pode-se afirmar que a partir destes pontos a macromolécula atingiu seu limite máximo de extensibilidade. Vê-se que para maiores valores do número de Deborah o estiramento da macromolécula se torna mais evidente a medida que \tilde{t} cresce, o que era de se esperar no regime anisotrópico. No encarte da figura (5.9) destaca-se a variação de R no regime elástico, ou no regime de pequenas deformações. Aqui fica evidente a dependência que R possui com De e que para valores pequenos deste último parâmetro o valor de R é pouco alterado ($R \approx 1$), visto que o escoamento não é intenso o suficiente para produzir um estiramento na macromolécula para $\tilde{t} < 1$.

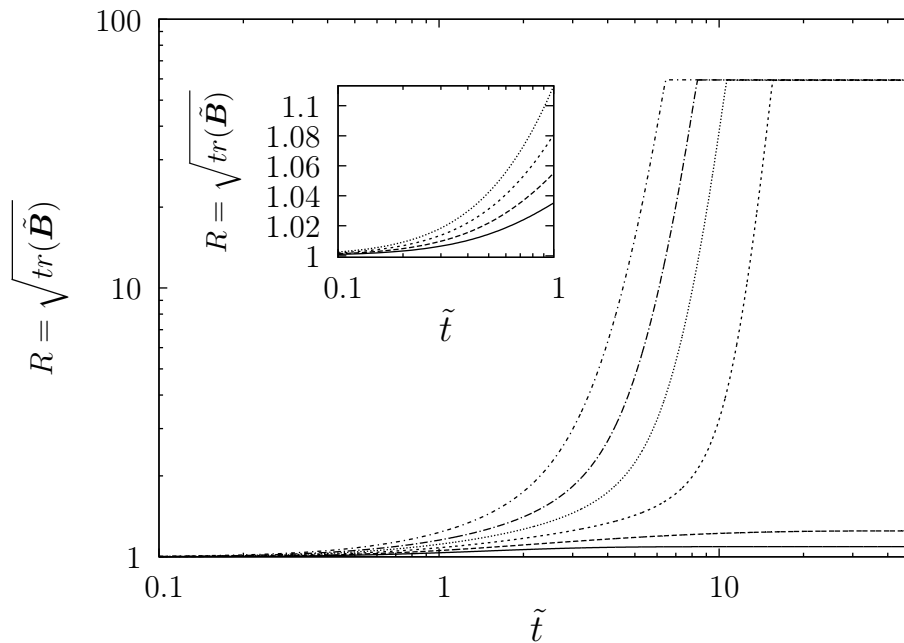


Figura 5.9: Valor do comprimento de $R^2 = tr(\tilde{\mathbf{B}})$ em função do tempo adimensional \tilde{t} . Aqui, de baixo para cima, os gráficos são referentes aos seguintes valores de Deborah: $De = 0.45; 0.55; 0.65; 0.75; 0.85; 1.00$. Os patamares alcançados nesta figura indicam que a macromolécula degradou, a partir dos respectivos \tilde{t} . No encarte desta figura tem-se em detalhe a pouca variação de $R \approx 1$ para $0.1 \leq \tilde{t} \leq 1$. Ainda no encarte, tem-se de baixo para cima, os seguintes valores de $De = 0.45; 0.55; 0.65; 0.75$. Parâmetros: $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

Um resultado também importante pode ser visto no gráfico da figura (5.10). Aqui apresenta-se a variação do parâmetro R , que mostra o quanto a macromolécula foi estirada pelo escoamento, em função do parâmetro De . Novamente a solução numérica foi obtida do sistema (5.27). Pode-se notar a transição entre os regimes elástico e anisotrópico para $De \approx 0.65$. Observa-se que para $De \ll 1$ o comprimento de conformacional R da macromolécula apresenta valores bem próximos da unidade, isto ocorre uma vez que neste regime a mola elástica do modelo utilizado inibe uma deformação considerável da estrutura fazendo com que $R \approx 1$ (vizinhanças de equilíbrio). Quando aumenta-se gradualmente o número de Deborah observa-se o limite $R \rightarrow L = 3.5$. Deste modo conclui-se que o efeito dominante para $De > 0.65$ é a anisotropia das macromoléculas. Excepcionalmente na figura (5.10) utilizou-se $L = 3.5$ e $\phi = 200 \text{ ppm}$.

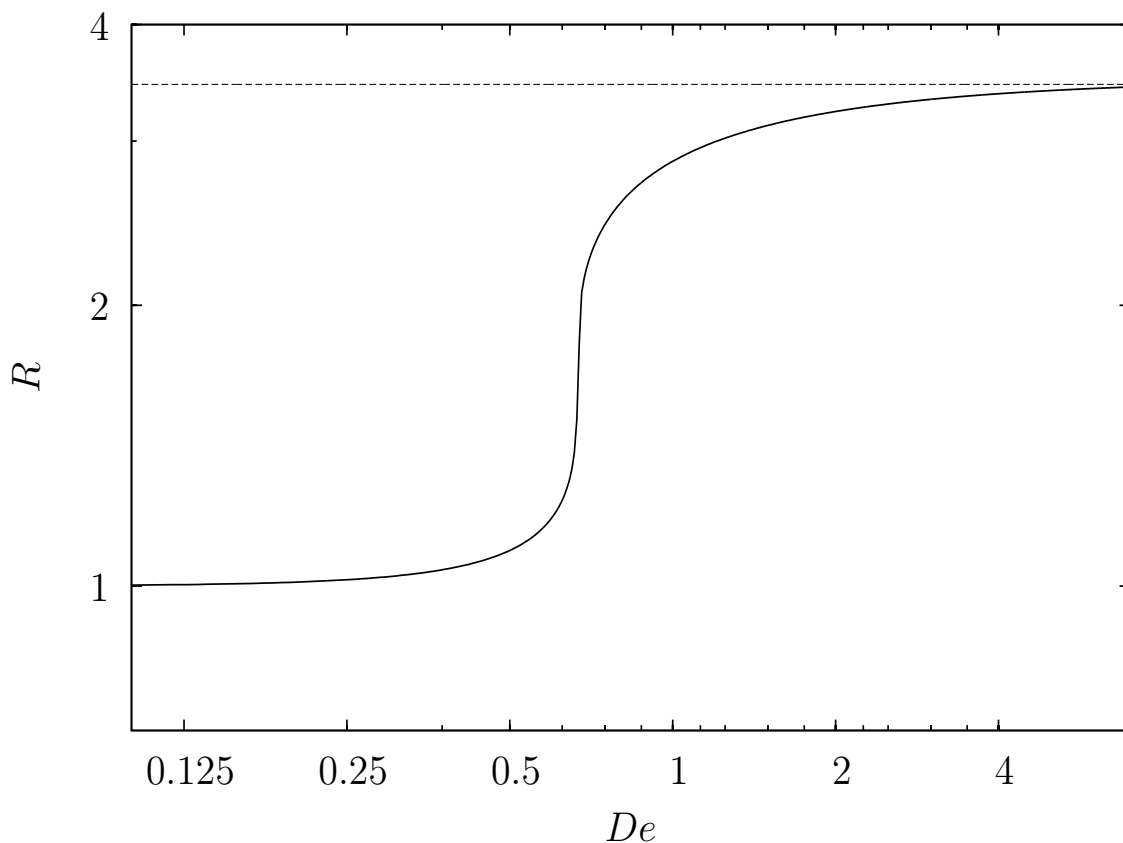


Figura 5.10: Na linha contínua tem-se a variação do comprimento de $R = \sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}$ em função do número de Deborah. Apresenta-se também o valor constante $R = 3.5$, na linha pontilhada. Parâmetros: $L = 3.5$ e $\phi = 200 \text{ ppm}$.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS ASSINTÓTICOS E NUMÉRICOS – ESCOAMENTOS TRANSIENTES

Este capítulo trata, em princípio, de apresentar os resultados assintóticos e numéricos dos escoamentos transientes como o cisalhamento oscilatório simples e extensional oscilatório. Serão ainda apresentados o algoritmo de frações continuadas e uma nova abordagem de obtenção da equação e evolução temporal do tensor conformação \mathbf{B} na seção (6.4).

6.1 Suspensão polimérica sujeita a escoamento por Cisalhamento Oscilatório

Conforme seção (2.8) o campo de velocidade dimensional de um cisalhamento oscilatório é expresso por

$$\mathbf{u}(t) = (\dot{\gamma} x_2, 0, 0) = (\dot{\gamma}_0 \cos(\omega t) x_2, 0, 0), \quad (6.1)$$

em que $\dot{\gamma}(t) = \gamma_0 \omega \cos(\omega t)$ e $\dot{\gamma}_0 = \gamma_0 \omega$, ω é a frequência de excitação do fluido. No presente contexto propõe-se a adimensionalização deste campo de velocidade usando $u_c = a/\tau_p$ como velocidade caracterísitica do escoamento e assume-se, ainda, $\tilde{\omega} = \omega \tau_p$, $t = \tilde{t} \tau_p$ e $De = \tau_p \dot{\gamma}_0 = \tau_p \gamma_0 \omega$. A admensionalização usando-se como referência o tempo de relaxação principal τ_p da macromolécula, se deve ao fato de se reduzir a escala de tempo adimensional de resposta da macromolécula no caso numérico, possibilitando a geração de dados mais consistentes com a física do problema. O campo de velocidade adimensional será dado por $\tilde{\mathbf{u}}(\tilde{t}) = \mathbf{u}(t)/u_c = (De \tilde{x}_2 \cos(\tilde{\omega} \tilde{t}), 0, 0)$.

E utilizando-se dos pares de equações (4.34) e (4.35),

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\tilde{\mu}(De)\tilde{\mathbf{D}} + \frac{9\phi f(R)}{2}\tilde{\mathbf{B}}, \quad (6.2)$$

e

$$\frac{d\tilde{\mathbf{B}}}{d\tilde{t}} = \tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}} \cdot (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2f(R)}{R} \left(\tilde{\mathbf{B}} - \frac{1}{3}\mathbf{I} \right), \quad (6.3)$$

obtem-se as medidas reológicas de interesse, com $R = \sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}$. Para este escoamento transiente o gradiente admensional do campo de velocidade e tensor taxa de deformação admensional, são dados, respectivamente por:

$$\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} 0 & De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & 0 \\ De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

O sistema para a solução numérica geral ($f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$) das componentes do tensor \mathbf{B} é dado por:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{22} - \frac{1}{3} \right), \\ \frac{d\tilde{B}_{12}}{d\tilde{t}} = De\tilde{B}_{22} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\frac{f(R)}{R}\tilde{B}_{12}, \\ \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = 2De\tilde{B}_{12} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{11} - \frac{1}{3} \right). \end{cases} \quad (6.5)$$

Para a solução assintótica propõe-se novamente o regime de pequenas deformações no qual $\gamma_0 \ll 1$, (ou $De \ll 1$). Como no caso do cisalhamento simples, pode-se novamente assumir que $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$. O sistema de equações diferenciais resultante da equação

(6.5) para o tensor conformação \mathbf{B} será agora dado por:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -2\tilde{B}_{22} + \frac{2}{3}, \\ \frac{d\tilde{B}_{12}}{d\tilde{t}} = De\tilde{B}_{22} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{B}_{12}, \\ \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = 2De\tilde{B}_{12} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{B}_{11} + \frac{2}{3}. \end{cases} \quad (6.6)$$

É importante mencionar que para este escoamento tem-se $\tilde{B}_{22}(\tilde{t}) = \tilde{B}_{33}(\tilde{t})$ e $\tilde{B}_{12}(\tilde{t}) = \tilde{B}_{21}(\tilde{t})$. Ao resolver a primeira equação do sistema (6.6) considerando um tempo adimensional $\tilde{t} > 4$, resulta que,

$$\tilde{B}_{22}(\tilde{t}) = \frac{1}{3}. \quad (6.7)$$

Neste ponto, substituindo a equação (6.7) na equação (6.2), obtém-se a solução assintótica de $\tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t}) = \tilde{\sigma}_{33}(\tilde{t})$ dada por:

$$\tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t}) = \tilde{\sigma}_{33}(\tilde{t}) = \frac{3}{2}\phi. \quad (6.8)$$

Note que a equação (6.8) é constante no tempo \tilde{t} e independente do parâmetro De .

Na sequência, substituindo a equação (6.7) na segunda equação do sistema (6.6), determina-se a seguinte solução assintótica para a componente \tilde{B}_{12} do tensor conformação $\tilde{\mathbf{B}}$:

$$\tilde{B}_{12}(\tilde{t}) = \frac{De}{3} \left(\frac{\tilde{\omega} \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) + 2 \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{\tilde{\omega}^2 + 4} \right), \text{ para } De \ll 1. \quad (6.9)$$

O interesse agora é também determinar a tensão de cisalhamento $\tilde{\sigma}_{12}$. Substituindo a equação (6.9) na equação (6.2), resulta, para $De \ll 1$:

$$\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t}, \tilde{\omega}, De) = \left(De \tilde{\mu}(De) + \frac{3\phi De}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} \right) \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{3\tilde{\omega}\phi De}{2(\tilde{\omega}^2 + 4)} \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}), \quad (6.10)$$

o primeiro termo do lado direito desta última equação representa a viscosidade de um fluido Newtoniano generalizado e os termos que envolvem o termo ϕ são contribuições devido a presença das macromoléculas. Vale notar que $\phi \rightarrow 0$ implica $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t}) \rightarrow De \tilde{\mu}(De) \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$.

Para comparar a equação (6.10) com a equação (2.100), é necessário que esta última esteja também na forma adimensional. Para isto, basta usar: $\tilde{\sigma}_{12} = \sigma_{12}\tau_p/\mu_w$, $t = \tilde{t}\tau_p$ e $De = \dot{\gamma}_0\tau_p = \gamma_0\tilde{\omega}$ na equação (2.100). A expressão geral adimensional para a função $\sigma_{12}(t)$ é obtida como sendo,

$$\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t}, \tilde{\omega}, De) = \tilde{\eta}' De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \tilde{\eta}'' De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) \quad (6.11)$$

em que $\tilde{\eta}' = \eta'/\mu_w$ e $\tilde{\eta}'' = \eta''/\mu_w$.

Comparando as equações (6.10) e (6.11) tem-se as expressões para as funções viscoelásticas $\eta'(\tilde{\omega})$ e $\eta''(\tilde{\omega})$, em sua forma adimensional, a saber:

$$\tilde{\eta}'(\tilde{\omega}) = \tilde{\mu}(De) + \frac{3\phi}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} \quad \text{e} \quad \tilde{\eta}''(\tilde{\omega}) = \frac{3\tilde{\omega}\phi}{2(\tilde{\omega}^2 + 4)}, \quad (6.12)$$

Afim de subtrair o efeito viscoso do fluido Newtoniano generalizado da primeira equação de (6.12), define-se a seguinte expressão para o coeficiente relativo em fase com a excitação, $\tilde{\eta}'_r$, como sendo:

$$\tilde{\eta}'_r(\tilde{\omega}) = \tilde{\eta}'(\tilde{\omega}) - \tilde{\mu}(De) = \frac{3\phi}{(\tilde{\omega}^2 + 4)}. \quad (6.13)$$

É importante observar que pode-se representar as equações em (6.12) como no modelo clássico de viscoelasticidade linear de Maxwell (ou fluido de Maxwell), da mesma forma que apresentado nas equações (2.134). Segue:

$$\tilde{\eta}'_r = \frac{3\phi}{4} \left[\frac{1}{1 + (\omega^*)^2} \right] \quad \text{e} \quad \tilde{\eta}'' = \frac{3\phi}{4} \left[\frac{\omega^*}{1 + (\omega^*)^2} \right]. \quad (6.14)$$

Aqui defini-se $\omega^* = \tilde{\omega}/2$. Sendo assim, no limite assintótico, $De \ll 1$, tem-se que o fluido se comporta como um fluido de Maxwell. Esta característica será novamente tratada quando na determinação da função relaxação de tensão Φ , na seção (6.1.7).

Conforme especificado na seção (2.8), $\eta'(\tilde{\omega})$ é a componente em fase da viscosidade complexa com $\dot{\gamma}$, também chamado de módulo viscoso, e está associado à energia de dissipação. O módulo $\eta''(\omega)$ é a componente fora de fase com $\dot{\gamma}$, chamado de módulo elástico e está associado com armazenamento de energia no fluido.

As figuras (6.1) e (6.2) mostram os gráficos dos respectivos módulos em regime linear, isto é, $De \ll 1$. Ressalta-se os dois limites assintóticos $\tilde{\omega} \rightarrow 0$ e $\tilde{\omega} \rightarrow +\infty$ das equações em (6.12), os quais também podem ser vistos nos referidos gráficos (6.1) e (6.2). Note que quando $\tilde{\omega} \rightarrow 0$ implica que $\tilde{\eta}'_r(\tilde{\omega}) \rightarrow 3\phi/4$ e $\tilde{\eta}''(\tilde{\omega}) \rightarrow 0$, características típicas de um fluido de Maxwell. Veja no gráfico (6.1) que $\tilde{\eta}'_r(\tilde{\omega})/\phi \rightarrow 3/4$ para $\tilde{\omega} \approx 0$. Este limite é o de baixa frequência $\tilde{\omega}$ que corresponde ao caso puramente viscoso sem efeitos elásticos. Apartir de $\tilde{\omega} \approx 10^{-1}$ nota-se uma diminuição no módulo viscoso relativo $\tilde{\eta}'_r$ enquanto que o módulo elástico $\tilde{\eta}''$ aumenta até atingir seu ponto máximo de $\tilde{\eta}''(\tilde{\omega})/\phi = 3/8 = 0.375$, que ocorre em $\tilde{\omega} = 2$. Em altas frequências o regime do escoamento torna a ser puramente viscoso, correspondendo a um fluido newtoniano equivalente.

No limite $\tilde{\omega} \rightarrow +\infty$ (altas frequências) observa-se que $\tilde{\eta}'_r(\tilde{\omega}) \rightarrow 0$ e $\tilde{\eta}''_r(\tilde{\omega}) \rightarrow 0$. Neste regime tem-se que a escala de tempo de relaxação das macromoléculas é muito maior do que a escala de tempo do escoamento, e assim a escala microestrutural do material não consegue responder à excitação do escoamento. Ainda nas figura (6.1) e (6.2) se observa o regime de viscoelasticidade linear, para uma frequência $\tilde{\omega}$ entre 10^{-1} e 10, e neste regime o material apresenta as respostas elásticas e viscosas.

Vale notar que quando $\phi \rightarrow 0$, ambos $\tilde{\eta}'_r$ e $\tilde{\eta}''_r$ tendem a zero, correspondendo a um efeito muito pequeno ou nulo das macromoléculas. E que existe uma boa comparação qualitativa entre estes resultados numéricos e os resultados experimentais vistos na figura (3.10).

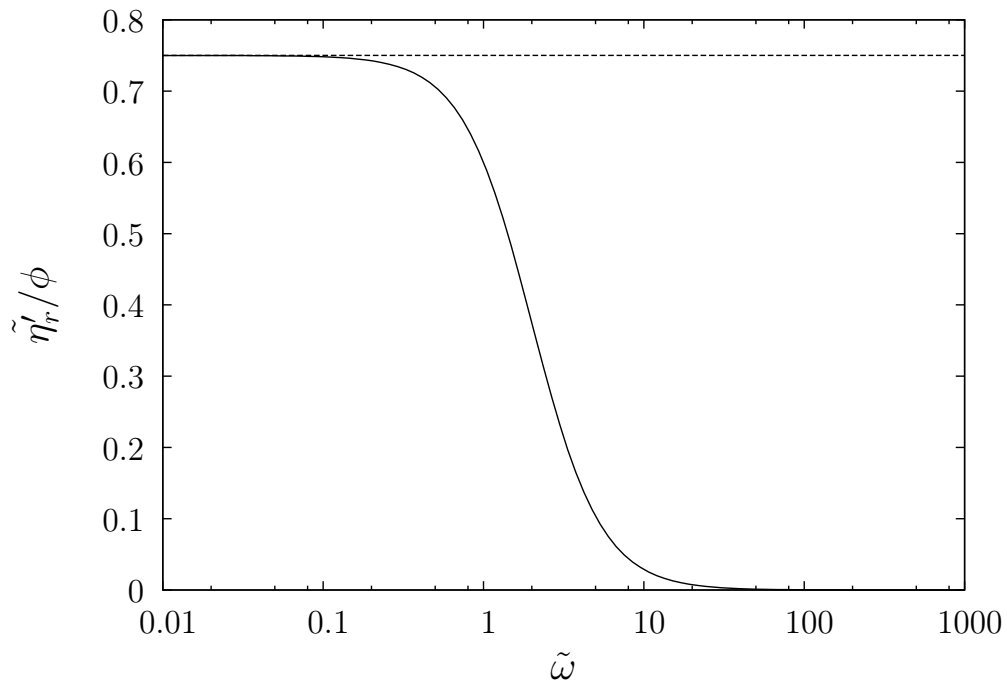


Figura 6.1: Solução assintótica do coeficiente viscoso relativo, $\tilde{\eta}'_r/\phi$, em função da frequência adimensional $\tilde{\omega}$. Na linha pontilhada tem-se o valor constante $\tilde{\eta}'_r = 0.75$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

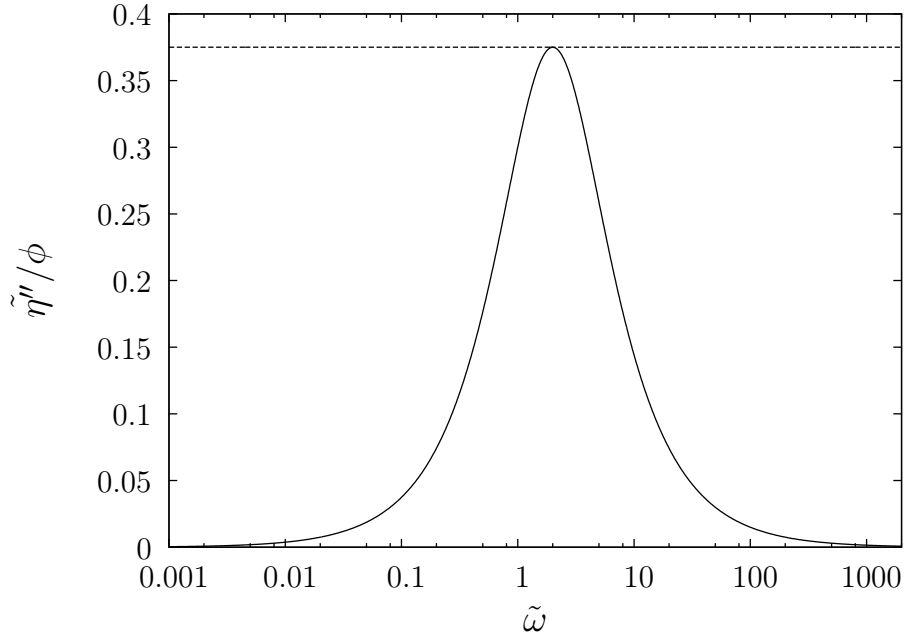


Figura 6.2: Solução assintótica do coeficiente elástico em função da frequência adimensional. Na linha pontilhada tem-se o valor constante $\tilde{\eta}''/\phi = 0.375$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

Determina-se agora a solução assintótica ($De \ll 1$) da primeira diferença de tensões normais adimensional, $\tilde{N}_1 = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22}$. É válido lembrar que as tensões normais estão ligadas a efeitos não lineares anisotrópicos da resposta do fluido, uma vez aplicada a excitação no material. É de se esperar das tensões normais que $\tilde{\sigma}_{11} = \tilde{\sigma}_{22} = \tilde{\sigma}_{33}$, no regime de pequenas deformações, i.e., ao usar a hipótese $De \ll 1$ do regime de viscoelasticidade linear. Outro fato consolidado na literatura [4] é que as diferenças de tensões normais podem se tornar não nulas uma vez que um escoamento mais intenso é aplicado, fato este que foi constatado em [4] e discutido anteriormente na seção do cisalhamento simples.

Para obtenção de $\tilde{\sigma}_{11}$ necessita-se da função $\tilde{B}_{11}(\tilde{t})$, resolvendo-se a terceira equação do sistema (6.6). Para o regime assintótico nas vizinhanças do equilíbrio, $De \ll 1$, tem-se \tilde{B}_{11} dado por:

$$\tilde{B}_{11}(\tilde{t}) = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \frac{De^2}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} + \frac{1}{6} \frac{(2De^2 - De^2\tilde{\omega}^2)}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \cos(2\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{1}{2} \frac{De^2\tilde{\omega}}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \sin(2\tilde{\omega}\tilde{t}). \quad (6.15)$$

Note que para $De \rightarrow 0$ o número $De^2 \approx 0$, o que implica que pode-se desprezar os termos que envolvem De^2 na equação (6.15). Neste limite resulta apenas $\tilde{B}_{11}(0) = 1/3$, o que corresponde a condição do PVI mais geral.

Agora, substituindo a equação (6.15) na equação (6.2), obtem-se

$$\tilde{\sigma}_{11}(\tilde{t}) = \frac{3\phi}{2} + \frac{3}{2} \frac{De^2\phi}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} + \frac{3}{4} \frac{\phi De^2(2 - \tilde{\omega}^2)}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \cos(2\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{9}{4} \frac{\phi De^2 \tilde{\omega}}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \sin(2\tilde{\omega}\tilde{t}). \quad (6.16)$$

De maneira similiar ao parágrafo anterior no caso $De \rightarrow 0$ então pode-se considerar o limite da equação (6.16) como sendo apenas $\tilde{\sigma}_{11}(\tilde{t}) = 3\phi/2$. E uma vez que $\tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t}) = 3\phi/2$ (eq. (6.8)) então $\tilde{N}_1 = 0$. Resultado esperado em $\mathcal{O}(De)$ uma vez que \tilde{N}_1 em baixos números de De já possui uma dependência $\mathcal{O}(De^2)$.

Passa-se então a determinação de \tilde{N}_1 para o limite de pequenos De mas não nulo, resultando na contribuição $\mathcal{O}(De^2)$. Portanto substituindo a equação (6.16) na expressão da diferença de tensões normais, $\tilde{N}_1 = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22}$, tem-se, para $0 \neq De \ll 1$, a seguinte equação:

$$\tilde{N}_1(\tilde{t}) = \frac{3}{2} \frac{De^2\phi}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} + \frac{3}{4} \frac{\phi De^2(2 - \tilde{\omega}^2)}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \cos(2\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{9}{4} \frac{\phi De^2 \tilde{\omega}}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \sin(2\tilde{\omega}\tilde{t}). \quad (6.17)$$

Perceba-se que ao excitar o material de modo oscilatório numa frequência fundamental $\tilde{\omega}$, a primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 apresenta uma resposta na frequência $2\tilde{\omega}$, pois já se caracteriza como uma contribuição não-linear. Na condição de ser $\tilde{\omega} = \tau_p\omega = 0$ a equação (6.17) fica reduzida a $\tilde{N}_1(De) = \frac{3}{4}\phi De^2$, recuperando novamente a solução assintótica de \tilde{N}_1 no caso do cisalhamento simples, i.e., a equação (5.9). Enfatiza-se que mesmo na hipótese de pequenas deformações ($De \ll 1$) a resposta para \tilde{N}_1 já é não linear com De .

6.1.1 Resultados Numéricos para $\tilde{\sigma}_{12}$ quando assume-se a contribuição viscosa e elástica.

Nesta seção, serão apresentados alguns resultados obtidos das simulações numéricas para o cisalhamento oscilatório no domínio do tempo adimensional \tilde{t} . A grandeza examinada agora será a tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}$ dada pela equação (6.2). O termo $\tilde{\mu}_s(De)$ é calculado conforme o modelo de Cross, onde não mais usa-se os coeficientes de ajuste da PAMA. Como já analisado nos casos anteriores o parâmetro de entrada fundamental será o número de Deborah, De . Fixa-se $\tilde{\omega} = \tau_p\omega = 1$. Os gráficos apresentados nesta seção foram gerados por meio da solução por integração numérica do sistema (6.5). E com a solução do tensor conformação $\tilde{\mathbf{B}}$, substitui-se na equação (6.2) do tensor de tensões adimensional $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ a fim de se obter a componente $\tilde{\sigma}_{12}$.

A figura (6.3) mostra uma comparação entre a solução numérica da equação (6.2) e a solução assintótica, para o caso em que $De \ll 1$, dada pela equação (6.10). Para a simulação numérica utilizou-se $De = 0.1$, $L = 60$ e $\tilde{\omega} = 1$. Verifica-se na figura (6.3) uma boa concordância entre estas soluções. Veja ainda o caso permanente correspondente a $\tilde{\omega} = 0$, de onde se vê que a amplitude máxima de oscilação é coincidente com o valor da solução em regime permanente.

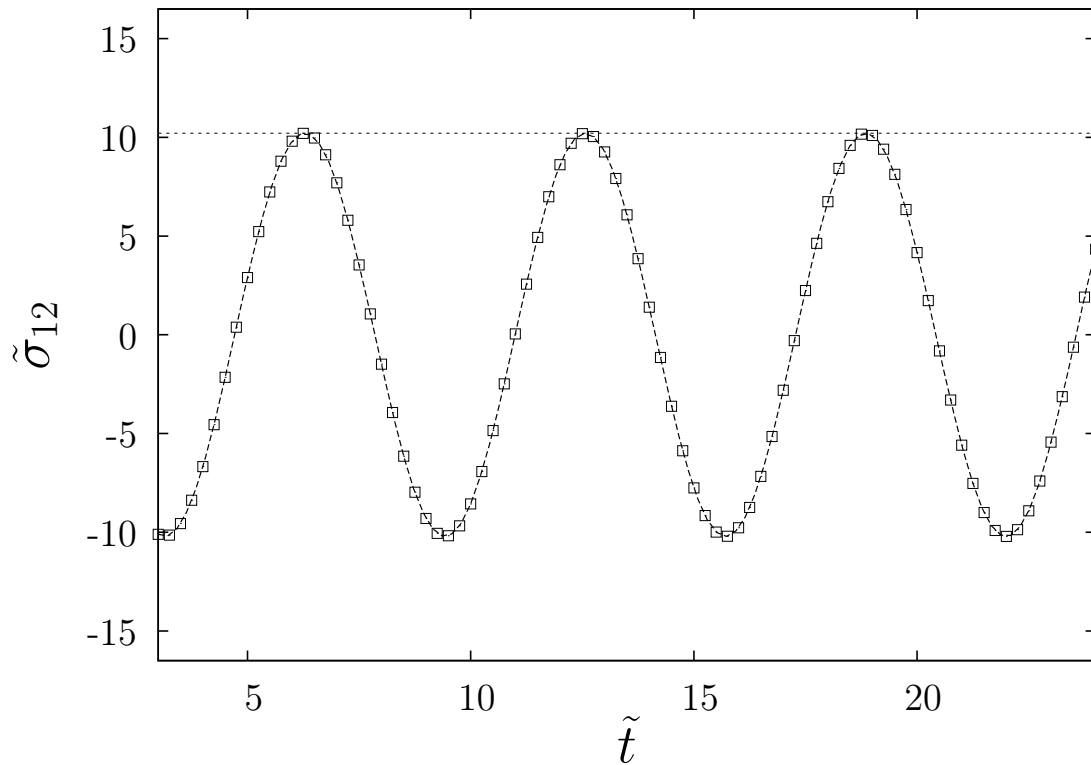


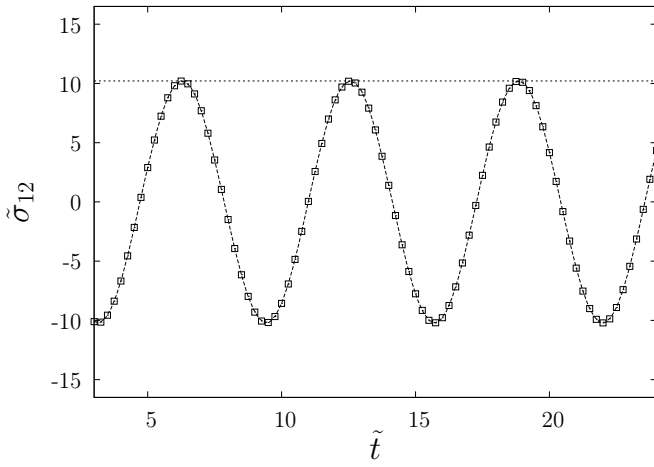
Figura 6.3: Comportamento da componente $\tilde{\sigma}_{12}$ em função do tempo adimensional. Os quadrados abertos denotam a solução numérica. A linha pontilhada que segue os quadrados abertos representam a solução assintótica dada pela equação (6.10). A solução constante, $\tilde{\sigma}_{12} \approx 10.2$, para o regime permanente $\tilde{\omega} = 0$ é apresentada na linha tracejada. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $De = 0.1$, $L = 60$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\tilde{\mu}(De) = 102.07$ dado pelo modelo de Cross.

Na figura (6.4)(a), (b) e (c), tem-se o resultado da resposta da tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}$ em função do tempo adimensional \tilde{t} , para vários valores do parâmetro Deborah, bem como seus respectivos valores para o caso do regime permanente em que $\tilde{\omega} = 0$. Nota-se que o valor constante de $\tilde{\sigma}_{12}$ coincide com o valor máximo de oscilação para cada caso apresentado. Nos quatro gráficos da figura (6.4), nota-se que a amplitude de oscilação aumenta consideravelmente quando se aumenta o parâmetro De . Isto era de se esperar uma vez que De funciona como uma taxa de cisalhamento adimensional no presente trabalho. Nota-se ainda (fig.(6.4)) que o perfil harmônico da resposta de $\tilde{\sigma}_{12}$ se mantém para todo De simulado. Este fato poderá ser confirmado nos diagramas de fase da figura (6.5) a seguir, nesta última figura pode-se ver sempre um círculo perfeito para cada valor do parâmetro De simulado. Estes diagramas de fase, por sua vez, tratam da comparação entre a derivada temporal de $\tilde{\sigma}_{12}$ com a própria função $\tilde{\sigma}_{12}$, para um período completo, i.e., do gráfico $d\tilde{\sigma}_{12}/d\tilde{t}$ por $\tilde{\sigma}_{12}$. Por fim, nas figuras (6.4) e (6.5) foi utilizado $\tilde{\mu}_s(De)$ segundo o modelo de Cross.

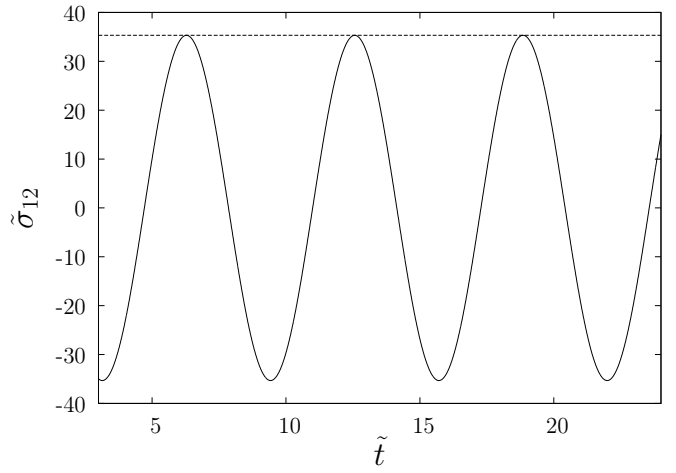
Na verdade, esta linearidade de $\tilde{\sigma}_{12}$ no modelo usado já era de se esperar, pois o que ocorre é que assumiu-se aqui a parte da viscosidade do fluido base Newtoniano mais a parte da conformação das macromoléculas, conforme equação geral de $\tilde{\sigma}_{12}$, i.e.,

$$\tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}) = \tilde{\mu}_s(De)De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{9}{2}\phi f(R)\tilde{B}_{12}(\tilde{t}). \quad (6.18)$$

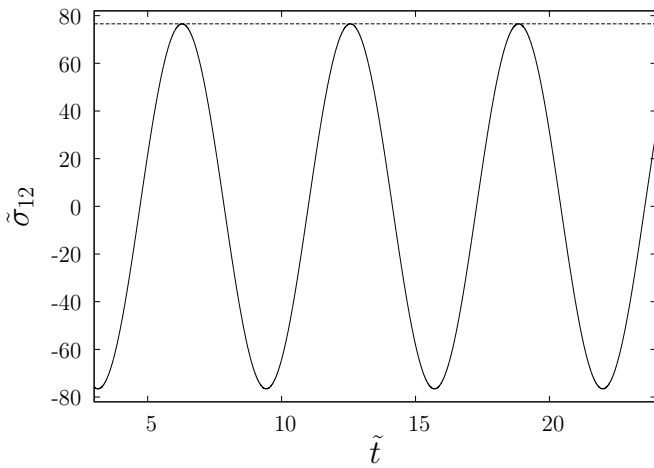
Os efeitos viscosos de $\tilde{\sigma}_{12}$ associados com a contribuição das macromoléculas são sempre pequenos quando comparados com a contribuição puramente viscosa. Na seção (6.1.2) a seguir se analisará apenas a contribuição das macromoléculas na resposta temporal de $\tilde{\sigma}_{12}$, donde se perceberá efeitos não lineares no comportamento da suspensão polimérica.



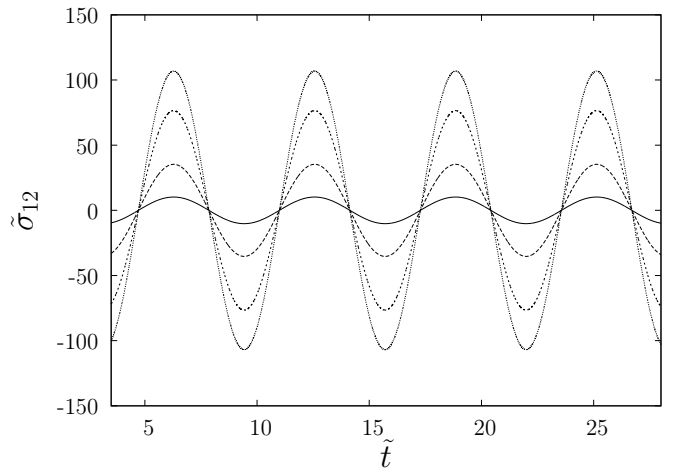
(a) $De = 0.1$



(b) $De = 1$



(c) $De = 5$



(d) $De = 0.1; 1; 5$ e 10 .

Figura 6.4: Comportamento da função $\tilde{\sigma}_{12}$ em função do tempo adimensional \tilde{t} para vários valores do número de Deborah. Em (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 0.1; 1; 5; 10$. Apresenta-se também a solução constante no regime permanente onde $\tilde{\omega} = 0$ para cada caso (a), (b) e (c). Em (d) tem-se em ordem crescente de amplitude os casos $De = 0.1; 1; 5$ e 10 , respectivamente. Foi utilizado ainda $\tilde{\mu}_s(De)$ de acordo com o modelo de Cross. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$.

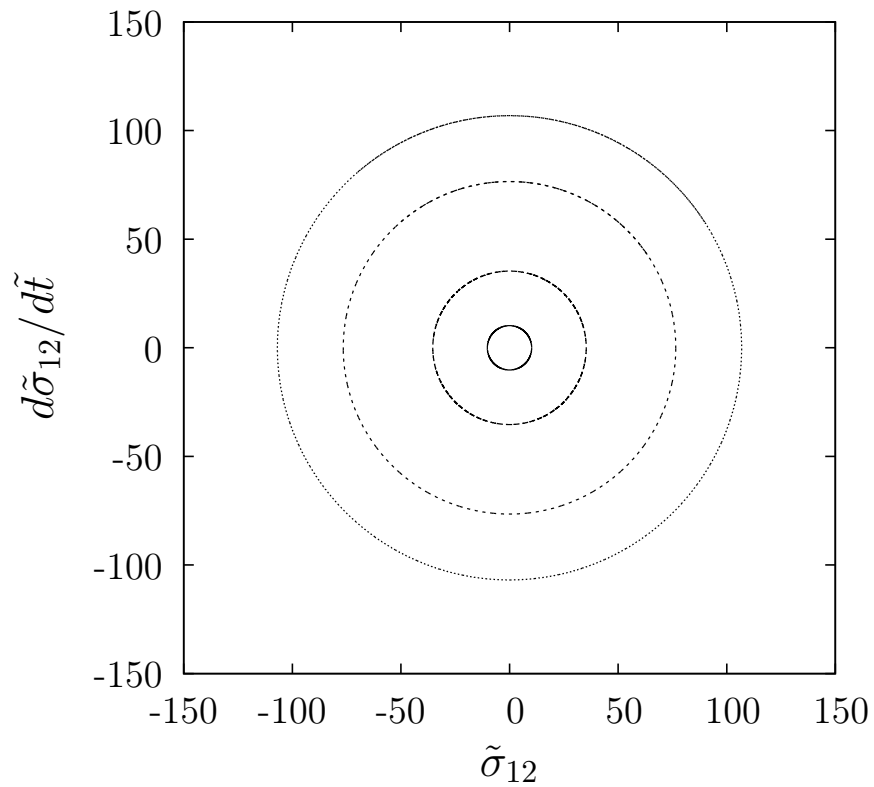


Figura 6.5: Diagramas de fase de $\tilde{\sigma}_{12}$ para vários valores do parâmetro De . Os diâmetros dos círculos aqui representados são numericamente iguais às amplitudes de oscilação da função $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ da figura (6.4). Aqui foi utilizado $\tilde{\mu}_s(De)$ de acordo com o modelo de Cross. Nos círculos concêntricos tem-se, do menor para o maior, os casos: $De = 0.1; 1; 5$ e 10 . Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

6.1.2 Resultados numéricos para $\tilde{\sigma}_{12}$ referente ao termo de conformação da macromolécula.

Foi visto na seção (6.1.1) que $\tilde{\sigma}_{12}$ apresentava um comportamento linear com De quando se considerava nesta função a equação completa (6.18) em que a parte puramente viscosa em seu sinal temporal é completamente dominante. Novamente, da equação geral para $\tilde{\sigma}_{12}$ dada pela equação (6.2), pode-se destacar as partes viscosa (parte newtoniana da suspensão polimérica – primeiro termo do lado direito) e elástica (proveniente da conformação das macromoléculas – segundo termo do lado direito), como sendo:¹

$$\tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}) = \tilde{\mu}_s(\phi)De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{9}{2}\phi f(R)\tilde{B}_{12}(\tilde{t}). \quad (6.19)$$

Lembremos ainda que foi determinada a solução assintótica de $\tilde{\sigma}_{12}$ para $De \ll 1$. Esta solução foi dada pela² equação:

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}) &= \left(De \tilde{\mu}_s(\phi) + \frac{3\phi De}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} \right) \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{3\tilde{\omega}\phi De}{2(\tilde{\omega}^2 + 4)} \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}), \\ \tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}) &= \underbrace{\tilde{\mu}_s(\phi)De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{3\phi De}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{3\tilde{\omega}\phi De}{2(\tilde{\omega}^2 + 4)} \sin(\tilde{\omega}\tilde{t})}_{\tilde{f}_{12}}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Comparando-se as equações (6.19) e (6.20) se vê que, mesmo no regime de pequenas deformações $De \ll 1$, se tem a contribuição elástica das macromoléculas, contribuição esta que é claramente diferente de zero. Defina-se a contribuição a $\tilde{\sigma}_{12}$ devido a conformação das macromoléculas como sendo a função \tilde{f}_{12} dada por:

$$\tilde{f}_{12} = \tilde{f}_{12}(De, \tilde{t}) = \frac{3\phi De}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{3\tilde{\omega}\phi De}{2(\tilde{\omega}^2 + 4)} \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}), \quad \text{para } De \ll 1. \quad (6.21)$$

A seguir examina-se apenas a contribuição da macromolécula da equação (6.19) para verificar o comportamento reológico de \tilde{f}_{12} . Para isto defina-se a função $\tilde{\sigma}_{12}^M(De, \tilde{t})$, como sendo:

$$\tilde{\sigma}_{12}^M(De, \tilde{t}) = \frac{\tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}) - \tilde{\mu}_s(\phi)De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{\phi} = \frac{9}{2}f(R)\tilde{B}_{12}(\tilde{t}), \quad \forall De, \quad (6.22)$$

em que $\tilde{\sigma}_{12}^M$ é chamada de tensão de cisalhamento das macromoléculas, para todo valor de De . O objetivo agora é verificar a diferença entre as equações (6.22) e (6.21), a fim de se

¹Aqui resolveu-se trabalhar com $\tilde{\mu}_s(\phi) = 1 + c\phi$, na verdade poderia ser $\tilde{\mu}_s(De)$ segundo o modelo de Cross, pois nesta seção desconsidera-se o primeiro o termo dado por $\tilde{\mu}_s De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$.

²Nesta seção o $\tilde{\omega}$ será fixo, por isso não se escreve $\tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}, \tilde{\omega})$.

observar apenas a contribuição viscosa da conformação das macromoléculas e notar quando as duas funções apresentam um erro relativo maior que 1%, isto é, observar para qual valor de De o regime de pequenas deformações deixa de valer para a parte de conformação que contribui para a função $\tilde{\sigma}_{12}$, dentro de um erro relativo menor que um por cento.

Prosseguindo, considere as equações (6.22) e (6.21) avaliadas em um mesmo tempo adimensional t^* e $\tilde{\omega} = 1$ fixos. Deste modo, tem-se as novas equações:

$$\tilde{\sigma}_{12}^M(De) = \frac{\tilde{\sigma}_{12}(De, t^*) - De\tilde{\mu}(\phi) \cos(t^*)}{\phi} = \frac{9}{2}f(R)\Big|_{t^*} \tilde{B}_{12}(t^*), \quad (6.23)$$

e

$$\frac{\tilde{f}_{12}(De)}{\phi} = \frac{3De}{5} \cos(t^*) + \frac{3De}{10} \sin(t^*), \quad (6.24)$$

que passam a ser só função de De . É instrutivo mencionar que a solução numérica de $\tilde{\sigma}_{12}^M$ foi obtida conforme a solução numérica de $\tilde{\sigma}_{12}$ da seção anterior.

A tabela (6.1) apresenta os resultados das funções $\tilde{\sigma}_{12}^M(De)$ e $\tilde{f}_{12}(De)$ avaliadas para alguns valores do parâmetro De . Para $De = 0.11$ já existe um erro relativo³ em módulo maior que 1% entre as funções. A figura (6.6) mostra uma comparação entre as funções \tilde{f}_{12} e $\tilde{\sigma}_{12}^M$ dadas pelas equações (6.23) e (6.24), sempre para t^* fixo e Deborah variando entre $0 \leq De \leq 1$. Ao se considerar apenas a contribuição das macromoléculas, o limite assintótico dado pela equação (6.21) deixa de valer para $De \approx 0.1$, o que indica que a partir deste ponto as macromoléculas da suspensão polimérica já sofrem uma deformação significativa, saindo do regime linear predito pela solução assintótica. No encarte da figura (6.6) observa-se uma boa concordância entre as funções \tilde{f}_{12} e $\tilde{\sigma}_{12}^M$ para De até $0.1 \ll 1$.

³*Erro relativo* = $100 \times (\tilde{\sigma}_{12}^M - \tilde{f}_{12})/\tilde{f}_{12}$.

Tabela 6.1: Valores das funções $\tilde{\sigma}_{12}^M$, \tilde{f}_{12} e erro relativo entre ambas, para vários valores do parâmetro De .

| De | $\tilde{\sigma}_{12}^M$ | \tilde{f} | $ Erro\ relativo $ |
|-------|-------------------------|------------------------|--------------------|
| 0.001 | 4.773×10^{-4} | 4.772×10^{-4} | 0.02% |
| 0.01 | 3.647×10^{-3} | 3.654×10^{-3} | 0.19% |
| 0.05 | 2.386×10^{-2} | 2.376×10^{-2} | 0.41% |
| 0.10 | 4.774×10^{-2} | 4.732×10^{-2} | 0.88% |
| 0.11 | 5.250×10^{-2} | 5.194×10^{-2} | 1.07% |

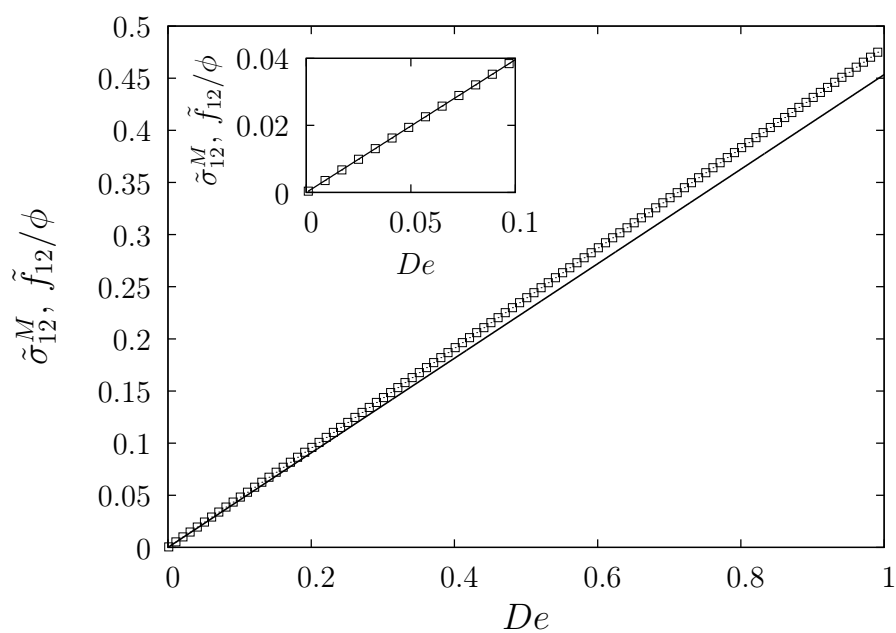


Figura 6.6: Contribuição dos efeitos da conformação das macromólecules na função $\tilde{\sigma}_{12}$. Os quadrados abertos denotam a solução numérica da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ (eq.(6.23)) e na linha contínua tem-se a solução da função \tilde{f}_{12}/ϕ (eq.(6.24)). No encarte vê-se em detalhes a comparação destas equações para $0 \leq De \leq 0.1$. Parâmetros: $L = 60$, $\phi = 400\text{ ppm}$, $\tilde{\mu}_s(\phi) = 17$ e $\tilde{\omega} = 1$.

A figura (6.7)(a) mostra uma boa concordância entre as soluções numéricas da equação (6.19) e a parte viscosa da conformação das macromoléculas para $De = 0.1$. Nos gráficos (b),(c) e (d) da figura (6.7) tem-se apenas o comportamento da série temporal da função $\tilde{\sigma}_{12}^M(De, \tilde{t})$ (eq.(6.22)) para vários valores do número de Deborah, de onde se vê agora a presença de efeitos não lineares, aparente na distorção das curvas, a medida que se aumenta o parâmetro De .

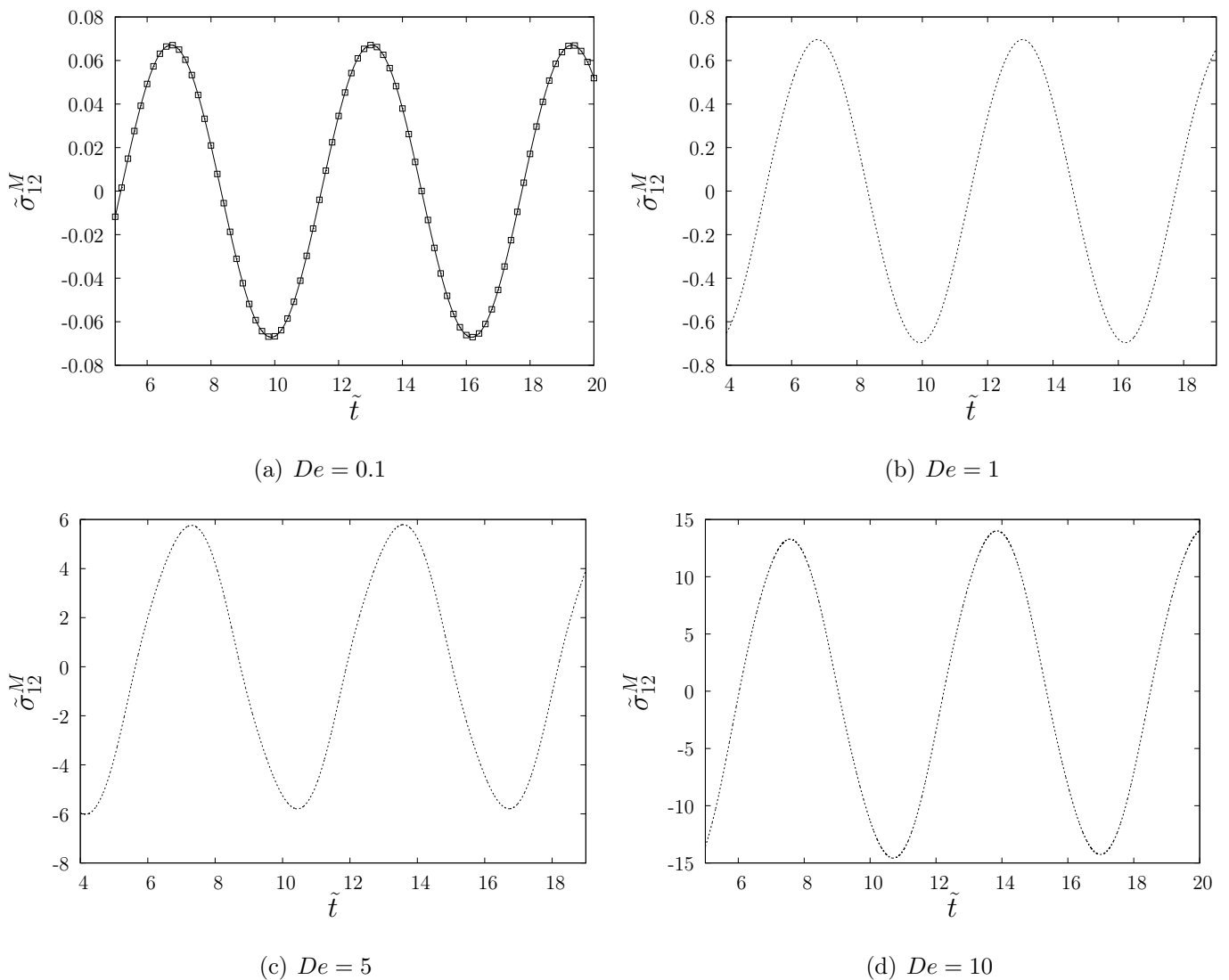


Figura 6.7: Contribuição viscosa da conformação das macromoléculas em função do tempo \tilde{t} . Em (a) $De = 0.1$, nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica da equação (6.22) e na linha contínua tem-se a função \tilde{f}_{12}/ϕ dada pela equação (6.21). Em (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$ tem-se também a variação temporal da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ (eq.(6.22)). Parâmetros utilizados: $L = 60$, $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\tilde{\mu}(\phi) = 17$.

A figura (6.8)(a) mostra o diagrama de fase para o caso linear ($De = 0.1$) da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$, de onde se vê um círculo perfeito como o da figura (6.5)(a), caracterizando uma resposta puramente harmônica sem variação de amplitude. Em (b),(c) e (d) na figura (6.8) tem-se agora os diagramas de fase da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ e, diferentemente da figura (6.5), observa-se uma deformação do perfil circular a medida que De aumenta, o que caracteriza de fato um comportamento não linear da resposta temporal da contribuição viscosa da conformação das macromoléculas da função $\tilde{\sigma}_{12}$.

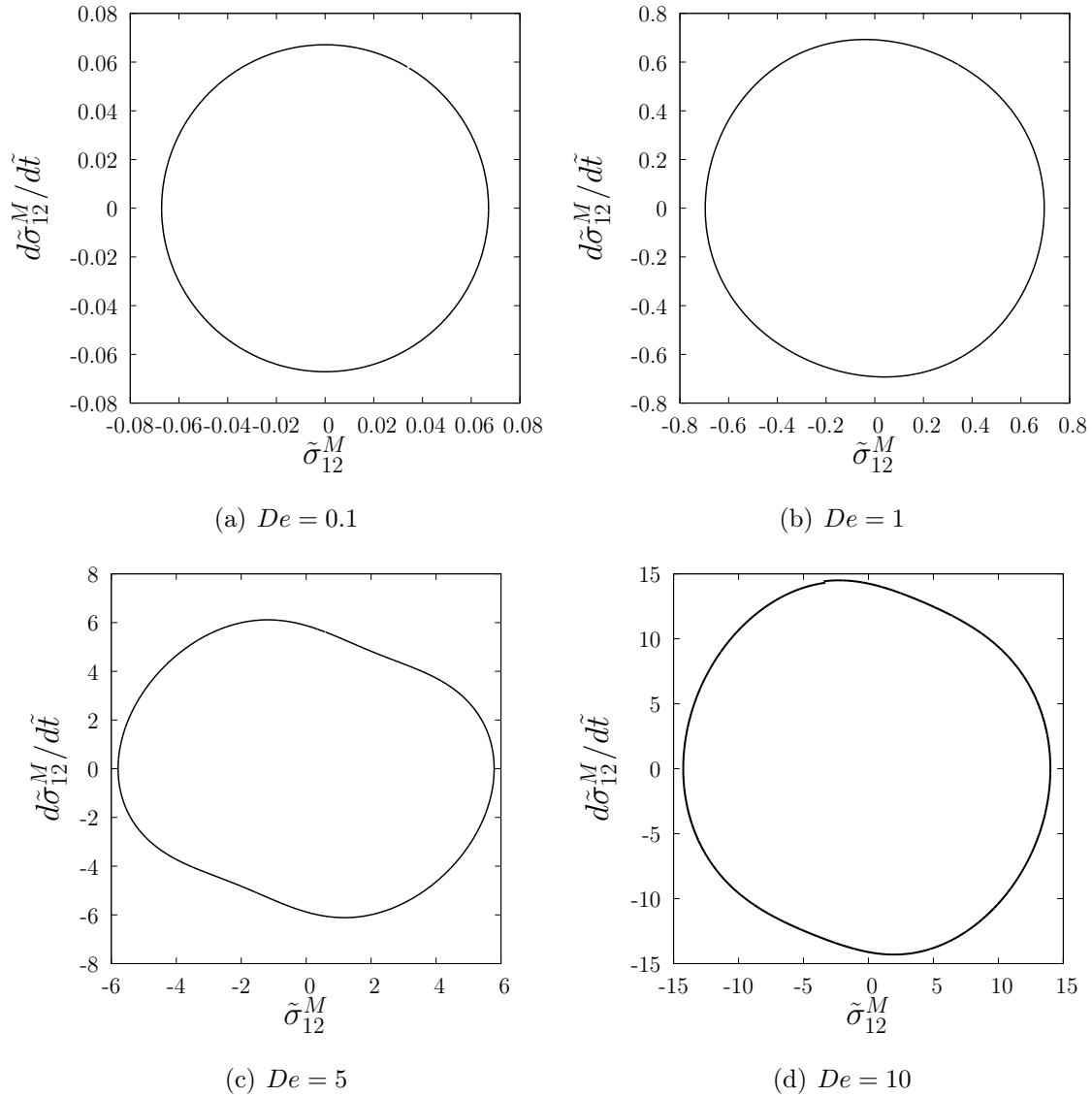


Figura 6.8: Diagramas de fase da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ para vários valores do parâmetro De . Em: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros: $L = 60$, $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\tilde{\mu}(\phi) = 17$.

6.1.3 Resultados no domínio da frequência $\tilde{\omega}$

A presente seção tem por finalidade apresentar os resultados, no domínio da frequência $\tilde{\omega}$, dos módulos viscoelásticos $\tilde{\eta}'_r$ e $\tilde{\eta}''_r$. Conclui-se que no regime viscoelástico linear destas grandezas reológicas dependem somente da frequência, enquanto que para regimes não lineares esta dependência será, também, função da taxa de cisalhamento, ou no presente contexto de quantidades adimensionais, do parâmetro De . Os gráficos desta seção que se seguem mostram a resposta do sistema de equações variando-se tanto o número de Deborah como a frequência de excitação adimensional $\tilde{\omega}$, para valores típicos já utilizados de $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

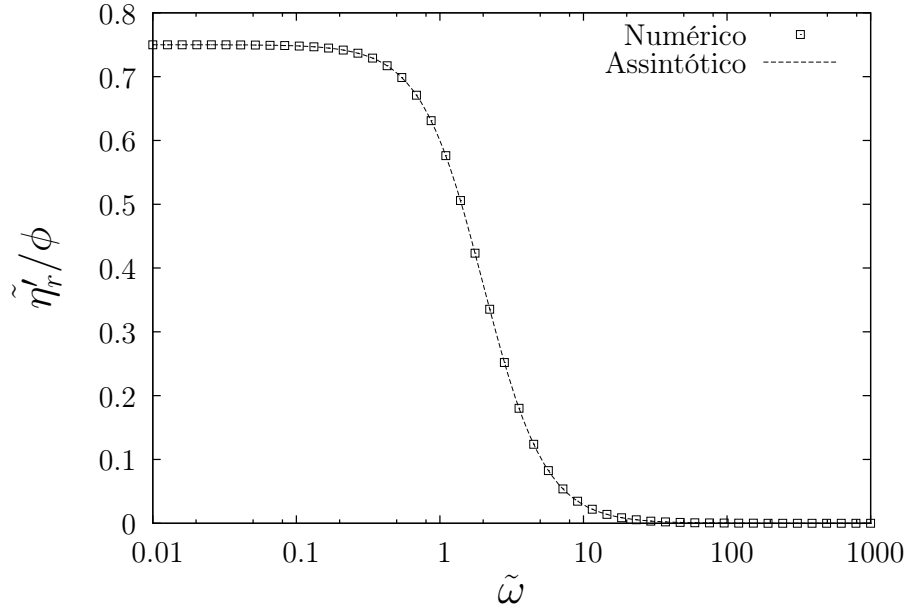
Primeiramente tem-se na figura (6.9) uma comparação entre as soluções assintóticas de $\tilde{\eta}'_r$ e $\tilde{\eta}''_r$, dadas pelas equações (6.13) e (6.12), respectivamente, e a solução numérica obtida do par de equações (6.2) e (6.3). Para efeitos de comparação a solução numérica foi obtida para $De = 0.1 \ll 1$ aplicando-se a Transformada Discreta de Fourier (DFT) ao sinal temporal da tensão de cisalhamento $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$, para vários valores de $\tilde{\omega}$ no intervalo $[10^{-2}, 10^3]$ e em seguida extraiu-se os coeficientes em fase e fora de fase com a excitação $\dot{\gamma}(\tilde{t}) = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$ imposta. A tensão de cisalhamento $\tilde{\sigma}_{12}$ foi obtida resolvendo-se a segunda equação do sistema (6.5) e posterior uso da equação (6.2).

A título de ilustração apresenta-se a DFT, aplicada em $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$, na equação abaixo:

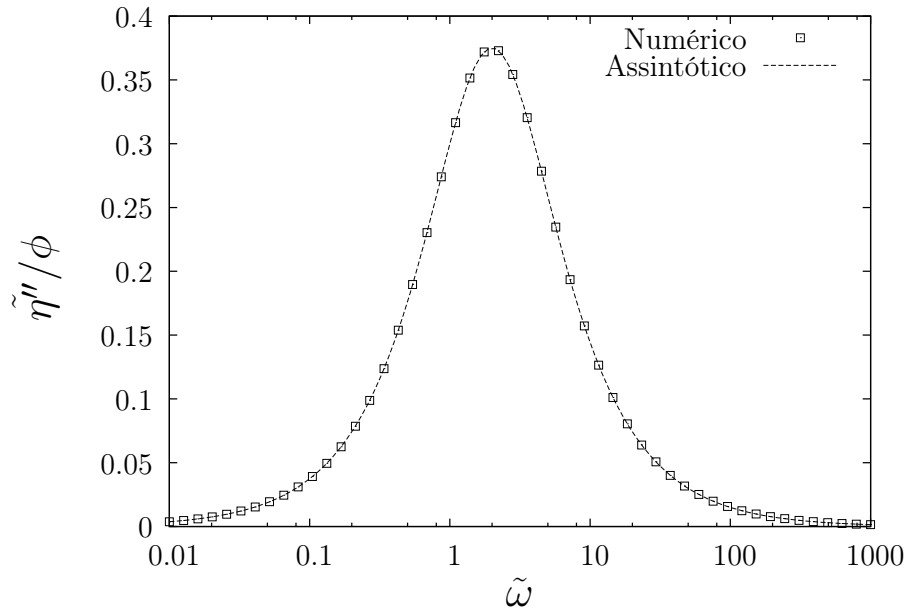
$$\mathbb{F}[\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^T \tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t}) \exp(-i\varpi\tilde{t}) d\tilde{t}, \quad (6.25)$$

com $i^2 = -1$ a unidade complexa, e $\varpi \in [10^{-2}, 10^2]$ variando no espaço de frequência da DFT.

Na figura (6.9) pode-se ver uma boa concordância entre as soluções assintótica e numérica, no caso $De = 0.1 \ll 1$, para os módulos viscoelásticos $\tilde{\eta}'_r$ e $\tilde{\eta}''_r$ dados pela equação (6.14). Em adição compara-se os gráficos da figura (6.9) com os da figuras (6.1) e (6.2). Verifica-se dos resultados da figura (6.9) um comportamento típico de um fluido de Maxwell. A discussão a respeito deste fluido, incluindo os limites de baixa e alta frequência já foi apresentada na seção (6.1).



(a) Módulo viscoso $\tilde{\eta}'/\phi$



(b) Módulo elástico $\tilde{\eta}''/\phi$

Figura 6.9: Comparação assintótico-numérico dos módulos viscoelásticos da tensão de cisalhamento $\tilde{\sigma}_{12}$. Em (a) tem-se o módulo relativo viscoso adimensional $\tilde{\eta}'/\phi$ assintótico (linha pontilhada) e numérico (quadrados abertos). Em (b) tem-se o módulo elástico adimensional $\tilde{\eta}''/\phi$ assintótico (linha pontilhada) e numérico (quadrados abertos). Parâmetros utilizados: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

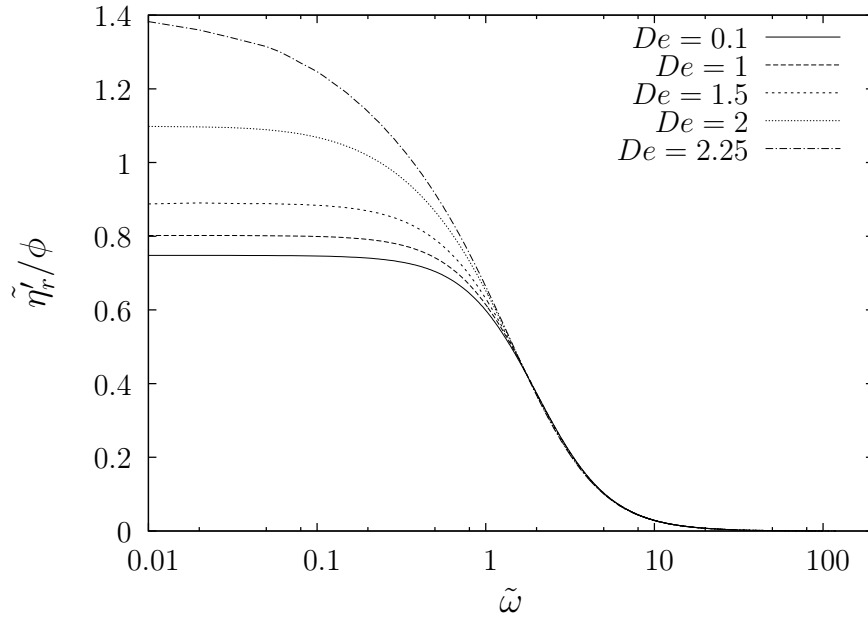
Na figura (6.10)(a) apresenta-se o gráfico do coeficiente em fase com a excitação $\tilde{\eta}'_r$ para vários valores do número de Deborah. Como dito anteriormente a função $\tilde{\eta}'_r$ possui propriedades dissipativas, mostrando um comportamento equivalente ao pseudoplástico (no inglês “*shear thinning*”) por diminuir com o aumento da frequência $\tilde{\omega}$, mesmo no regime viscoelástico linear, em que $De = 0.1$. Nota-se também um comportamento Newtoniano em baixas e altas frequências, com características puramente viscosas. No entanto, para valores maiores do parâmetro De e para frequências $\tilde{\omega} \approx 1$, observa-se um regime viscoelástico não linear em que efeitos viscosos e elásticos estão presentes no fluido com intensidades diferentes. Conclui-se portanto que num regime de viscoelasticidade não linear $\tilde{\eta}'_r$ é função da frequência adimensional $\tilde{\omega}$ e também do parâmetro De .

Em adição como $\tilde{\eta}'_r$ representa a contribuição para $\tilde{\sigma}_{12}$ apenas do termo de conformação da macromolécula tendo-se subtraído a contribuição puramente viscosa do fluido base equivalente, observa-se ainda na figura (6.10)(a) o aumento deste módulo viscoso em baixas frequências com o aumento de De . Este resultado indica um maior estiramento das macromoléculas pelo escoamento o que conseqüentemente se traduz como um efeito pseudoplástico como um todo. Em altas frequências ($\tilde{\omega} \gg De$) o período de excitação do escoamento é muito menor que o tempo de relaxação das macromoléculas mostrando que o parâmetro De não tem mais influência na resposta reológica. Devido a subtração do termo puramente viscoso as curvas tendem a zero em altas frequências.

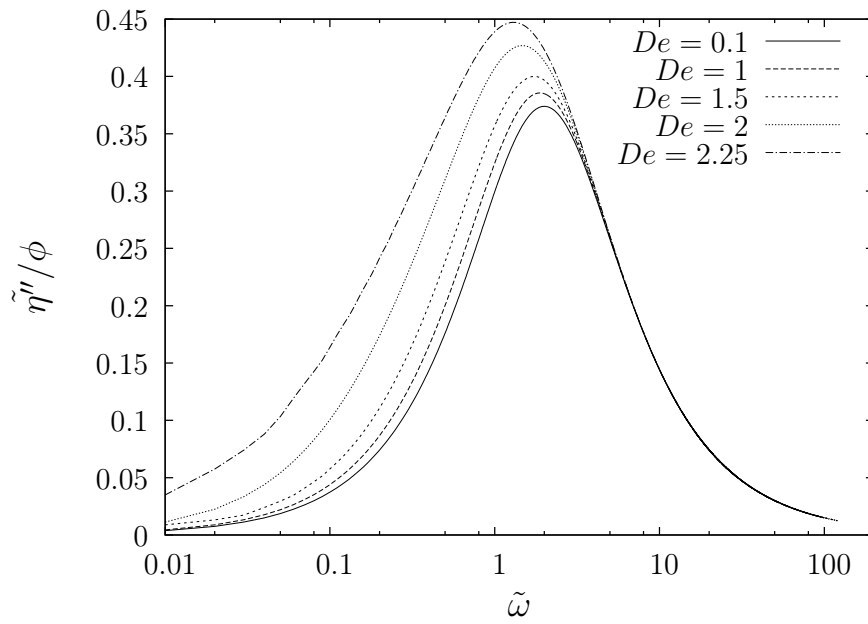
O coeficiente de Fourier fora de fase com a excitação $\tilde{\eta}''$ (chamado de módulo elástico) é apresentado na figura (6.10)(b), de onde se vê uma clara perda de simetria desta função à medida que se aumenta o valor de De , quando comparado com o caso linear $De = 0.1$. Esta perda de simetria se deve ao fato da inclusão de efeitos não-lineares à resposta de $\tilde{\eta}''$ a medida que se aumenta o valor de De . Tem-se ainda que para $\tilde{\omega} = 0.1$ e $De = 2.25$ o valor máximo de $\tilde{\eta}''$ é em torno de 4.4 vezes maior que no caso linear para este mesmo $\tilde{\omega}$. Verifica-se que em baixas e altas frequências o mecanismo de armazenamento de energia por efeitos elásticos é praticamente inexistente (quando comparado com o gráfico (a)) e deste modo pode-se dizer que o fluido possui apenas características viscosas.

Ainda na figura (6.10)(b) nota-se que o comportamento mesmo que seja semelhante a um fluido de Maxwell os regimes observados não correspondem a um regime de viscoelasticidade linear. Tem-se na verdade um comportamento viscoelástico de um fluido

de Maxwell-Oldroyd (FENE). O aumento de $\tilde{\eta}''/\phi$ com De é uma consequência direta da maior anisotropia produzida pelo maior estiramento das macromoléculas em regimes de baixas frequências ($\tilde{\omega} < 1$ ou $\tilde{\omega} \approx 1$). A suspensão polimérica passa a apresentar um espectro de tempo de relaxação em maiores De e conseqüentemente um maior e mais complexo efeito elástico surgirá para $\tilde{\omega} < 1.5$. Em baixas frequências $\tilde{\eta}''/\phi$ possui pouca variação visto que as macromoléculas encontram-se na condição de equilíbrio quase totalmente relaxadas. Novamente, em altas frequências não existe resposta elástica tendo em vista que o tempo de relaxação do material passa a ser muito maior do que o período de excitação. A macromolécula passa a se comportar como uma fibra rígida anisotrópica



(a) $\tilde{\eta}'_r/\phi$

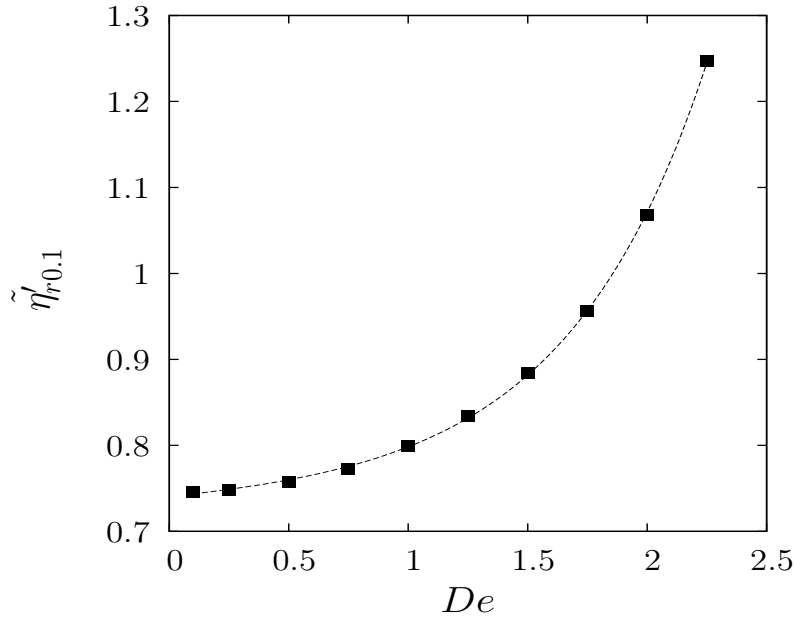


(b) $\tilde{\eta}''/\phi$

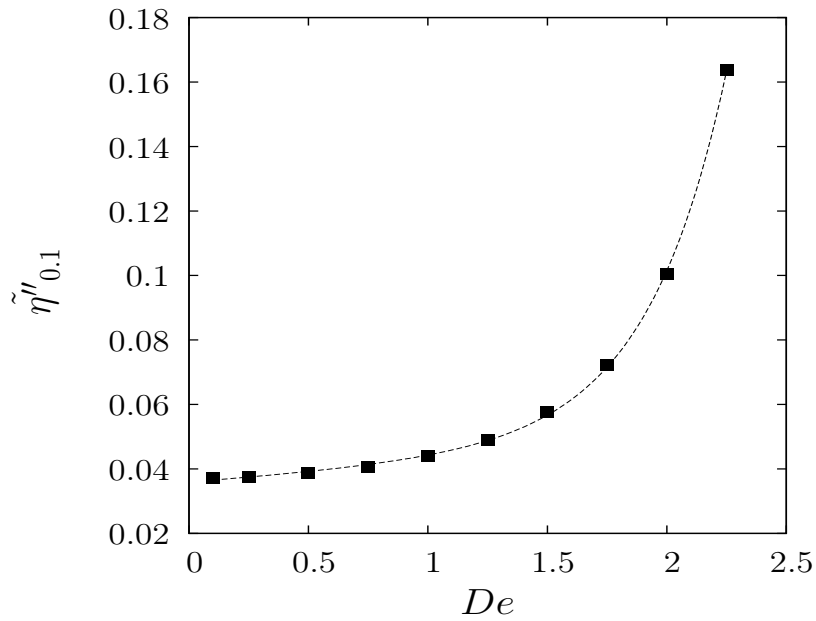
Figura 6.10: Resultados numéricos dos módulos viscoelásticos $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e $\tilde{\eta}''/\phi$ para vários valores do parâmetro De . Em (a) tem-se o módulo viscoso relativo $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e em (b) tem-se o módulo elástico $\tilde{\eta}''/\phi$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

Em adição, a figura (6.11) mostra o resultado dos módulos viscoelásticos $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e $\tilde{\eta}''/\phi$ para vários valores do parâmetro De avaliados na frequência $\tilde{\omega} = 0.1$ fixa. A escolha deste ponto $\tilde{\omega} = 0.1$ se deve ao fato de que na figura (6.10) as variações dos módulos viscoelásticos nesta frequência são bem significativos. Defina: $\tilde{\eta}'_r(\tilde{\omega} = 0.1)/\phi = \tilde{\eta}'_{r0.1}$ e $\tilde{\eta}''(\tilde{\omega} = 0.1)/\phi = \tilde{\eta}''_{0.1}$

Nota-se inicialmente dos gráficos (a) e (b) da figura (6.11) que os módulos viscoelásticos $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e $\tilde{\eta}''/\phi$ saem de seus regimes quase lineares para $De \approx 0.5$. Antes deste ponto observa-se um comportamento praticamente constante destes módulos, sendo dependentes apenas da frequência $\tilde{\omega} = 0.1$ para $De < 0.5$. Por outro lado, quando o fluido é submetido a maiores taxas de cisalhamento os módulos viscoelásticos passam a apresentar uma dependência também em De , como uma consequência do regime viscoelástico não-linear. Assim sendo pode-se ver que ambos os módulos aumentam com a variação do parâmetro De , devido ao estiramento das macromoléculas provocado por um escoamento de maior intensidade. Para De próximo a 2.5, a curva de $\tilde{\eta}''_{0.1}$ sofre um aumento considerável, quase paralelo ao eixo y , isto indica a possibilidade de ruptura da macromolécula do fluido a partir deste ponto. É importante enfatizar que as figuras (6.10) e (6.11) se referem apenas à contribuição das macromoléculas presentes no fluido.



(a) Módulo viscoso relativo $\tilde{\eta}'_r$



(b) Módulo elástico $\tilde{\eta}''$

Figura 6.11: Valores dos módulos viscoelásticos em função de De avaliados para a frequência $\tilde{\omega} = 0.1$ fixa. Os quadrados cheios em (a) e (b) denotam as soluções numéricas e as linhas pontilhadas representam os ajustes polinomiais $f(De)$ e $g(De)$. Em (a) tem-se a função f dada por $f(De) = 0.7462 + aDe^2 + bDe^4$ com $a = 0.0315$ e $b = 0.0129$. Em (b) a função g é dada por $g(De) = 0.0373 + cDe^2 + dDe^4$ com $c = -0.00387$ e $d = 0.005459$.

6.1.4 Espectros de potência de $\tilde{\sigma}_{12}$ considerando a contribuição viscosa e elástica

Como apresentado na equação (6.11), pode-se sempre ter a tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ como uma soma de cossenos e senos. De maneira geral assumi-se que:

$$\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t}, \tilde{\omega}, De) = \sum_{n=1}^M \left[A'_n(n\tilde{\omega}, De) \cos(n\tilde{\omega}\tilde{t}) + A''_n(n\tilde{\omega}, De) \sin(n\tilde{\omega}\tilde{t}) \right], \quad (6.26)$$

em que $M \rightarrow +\infty$ e ainda $A'_n(n\tilde{\omega}, De)$ e $A''_n(n\tilde{\omega}, De)$ são funções (ou propriedades viscoelásticas) em fase e fora de fase com a excitação $\dot{\gamma}(\tilde{t}) = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$, respectivamente. O que pretende-se fazer agora é excitar o fluido com uma frequência constante $\tilde{\omega} = 1$ e observar a resposta do mesmo nesta frequência fundamental de excitação e avaliar se por ventura aparecerão respostas ou modos oscilatórios nas frequências múltiplas de $\tilde{\omega} = 1$, chamadas de harmônicos de ordem superior. Neste contexto tem-se que $\varpi = n\tilde{\omega}$, $n = 1, 2, \dots$. Reforçando o que foi dito na seção (6.1.3), aplica-se a DFT a série temporal de $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ para $\tilde{\omega} = 1$ fixo e em seguida extrai-se os valores dos coeficientes A'_n e A''_n , $n = 1, 2, \dots$, do sinal gerado pela DFT. A notação usada para estes coeficientes de Fourier será: $E_{\tilde{\sigma}_{12}}(\varpi)$. Em adição percebe-se que os coeficientes de Fourier é um conjunto formado pelos seguintes pares ordenados: $E_{\tilde{\sigma}_{12}}(\varpi) = \{(\tilde{\omega}, A'_1), (2\tilde{\omega}, A'_2), \dots\} \cup \{(\tilde{\omega}, A''_1), (2\tilde{\omega}, A''_2), \dots\}$. É ainda comum na literatura [1] se referir a estes coeficientes como sendo, também, espectros de potência, sendo portanto esta nomenclatura utilizada de agora em diante.

A figura (6.12) mostra os módulos dos espectros de potência de $\tilde{\sigma}_{12}$ para quatro valores do número de Deborah, onde o sinal temporal gerado de $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ foi sempre para a frequência fundamental de excitação $\tilde{\omega} = 1$, conforme visto na seção (6.1.1). Como dito anteriormente (seção (6.1.1)) a série temporal de $\tilde{\sigma}_{12}(\tilde{t})$ apresenta um comportamento linear com De , quando se considera a parte puramente viscosa (dominante) nesta função, o que pode ser comprovado, mais uma vez, nos gráficos (a), (b), (c) e (d) da figura (6.12) onde nota-se que tem-se sempre a resposta do espectros de potência, $E_{\tilde{\sigma}_{12}}(\varpi)$, somente na frequência fundamental de excitação $\tilde{\omega} = 1$. Note ainda que os valores destes espectros de potência são numericamente iguais aos valores dos raios dos círculos na figura (6.5), respectivamente. Perceba, por fim, que tem-se apenas a resposta em fase, A'_1 , com a excitação nos quatro gráficos da figura (6.12).

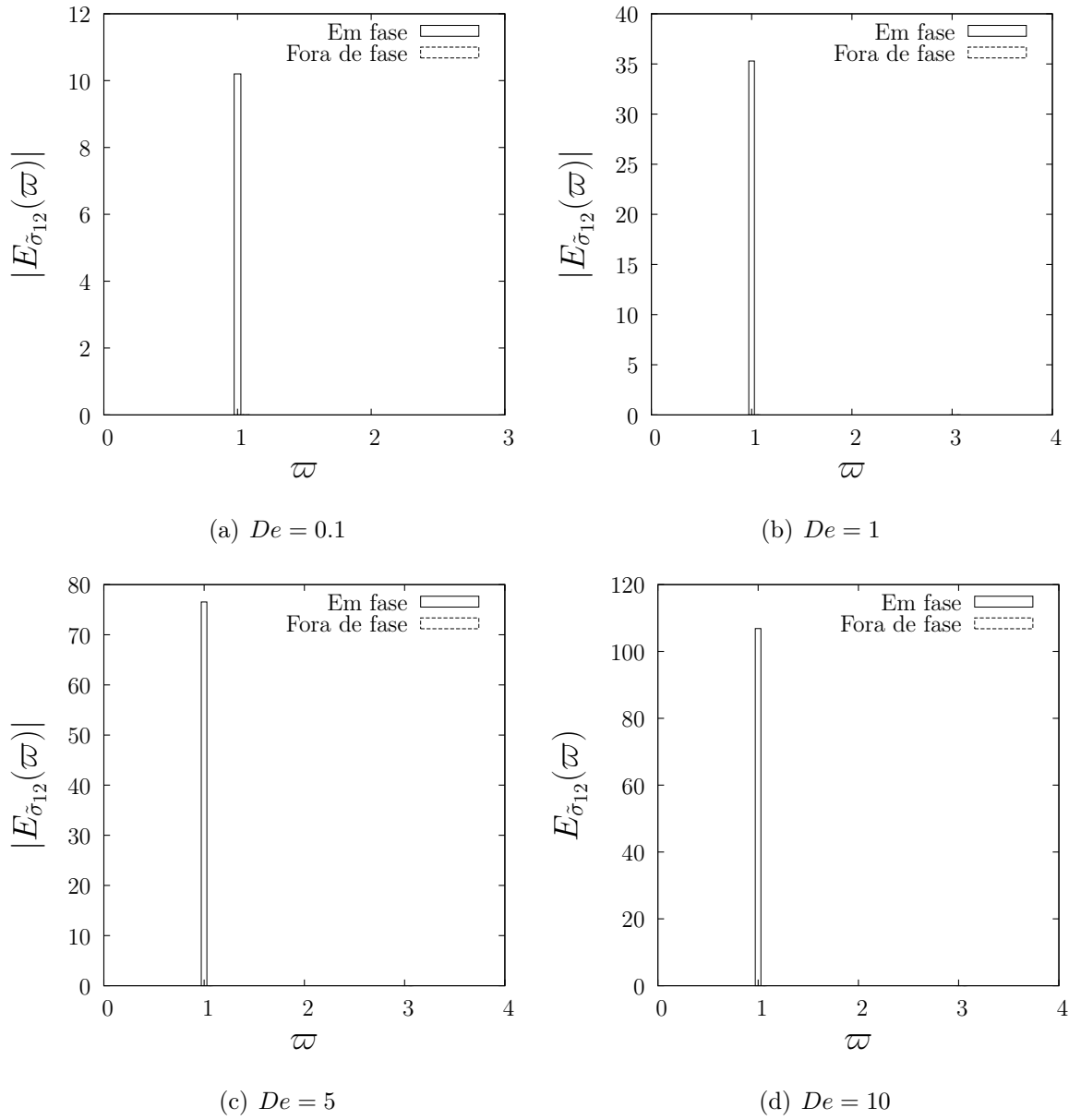
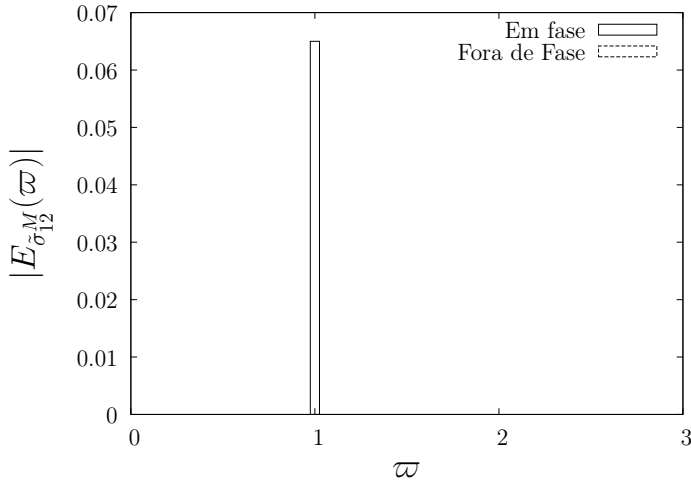


Figura 6.12: Espectros de potência para os coeficientes de Fourier ou módulos viscoelásticos em fase e fora de fase, da tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}$, para diferentes valores de De . Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$. Aqui foi utilizado $\tilde{\mu}_s(De)$ de acordo com a equação (5.14).

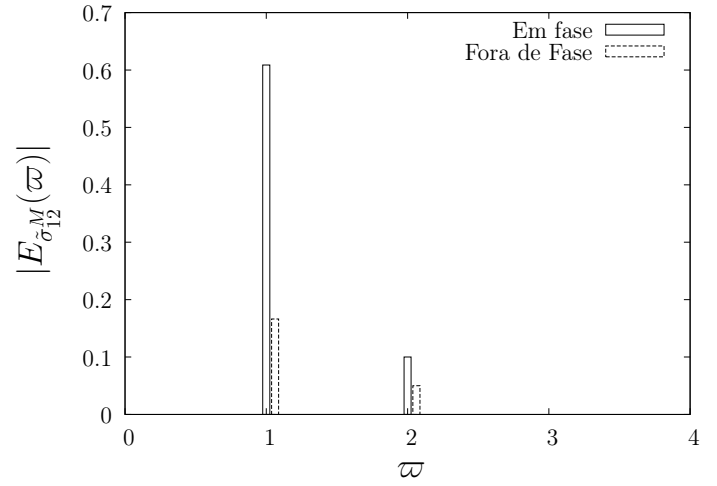
6.1.5 Espectros de potência de $\tilde{\sigma}_{12}$ considerando apenas a contribuição do termo de conformação da macromolécula

Diferentemente da seção (6.1.4), aqui apresenta-se os espectros de potência da tensão de cisalhamento da conformação das macromoléculas, definida por $\tilde{\sigma}_{12}^M$. Na figura (6.13), verifica-se que ao se considerar apenas a contribuição da configuração das macromoléculas percebe-se a presença de outros modos de vibração nos múltiplos da frequência fundamental $\tilde{\omega} = 1$. Este resultado se deve mais uma vez ao estiramento, anisotropia e relaxação das macromoléculas provocado por um escoamento mais intenso, que por sua vez faz aparecer os efeitos não-lineares ou graus de liberdade oscilatórios na resposta temporal da tensão de cisalhamento das macromoléculas $\tilde{\sigma}_{12}^M$.

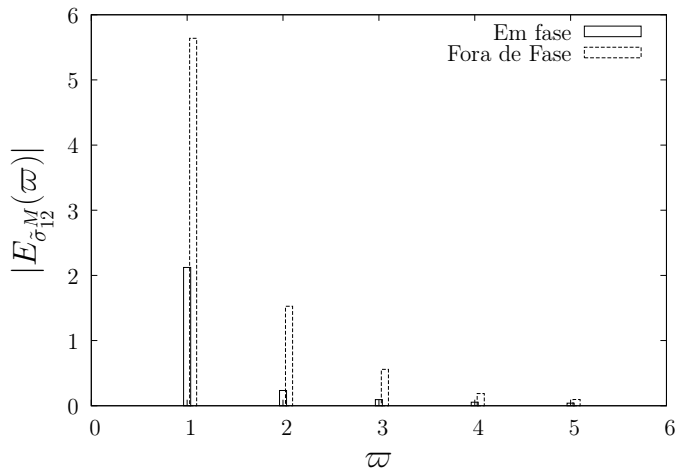
A figura (6.13)(a) apresenta apenas a resposta em fase com a excitação, dada por $\tilde{\gamma}(\tilde{t}) = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$. Nota-se ainda que esta resposta em fase possui módulo aproximadamente igual $|A_1'| = 0.06$. No entanto, a resposta fora de fase, A_1'' , neste caso foi inexistente. Isto se deve ao fato de que o escoamento não foi ainda suficiente para produzir estiramento e relaxação das macromoléculas que caracteriza um efeito elástico ou a presença de um módulo fora de fase com a excitação. Nos gráficos (b), (c) e (d) da figura (6.13) tem-se os módulos dos espectros de potência da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ para valores maiores de De e percebe-se a existência dos módulos dos espectros de potência também em harmônicos de ordem superior. Para $De = 10$, há $M = 6$ módulos vibracionais no espectro de potência, caracterizando um regime fortemente não linear e a tendência de uma transição de um espectro discreto de graus de liberdade vibracionais para um espectro contínuo com o aumento do parâmetro De . Nessas condições a resposta da macromolécula a um forçamento puramente harmônico é complexa, com um movimento oscilatório decomposto em várias frequências múltiplas da frequência fundamental de excitação.



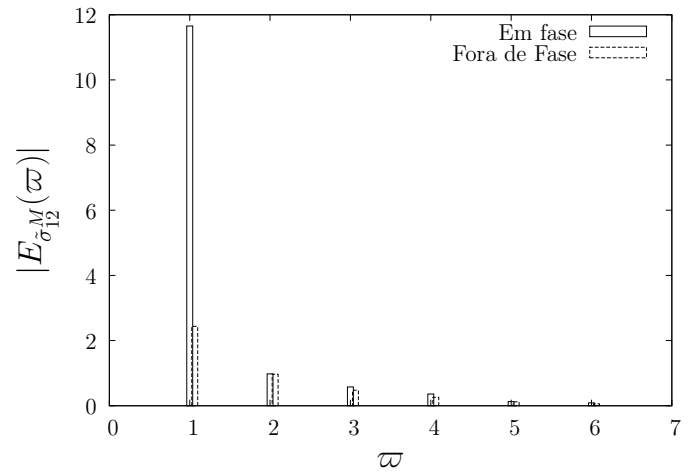
(a) $De = 0.1$



(b) $De = 1$



(c) $De = 5$



(d) $De = 10$

Figura 6.13: Espectros de potência em fase e fora de fase da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ para vários valores de De . Em: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros utilizados: $\tilde{\omega} = 1$, $L = 60$, $\tilde{\mu}_s = 17$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

6.1.6 Resultados Numéricos para \tilde{N}_1

Como feito nas três seções anteriores, é apresentado agora alguns resultados numéricos para a primeira diferença de tensões normais adimensional, $\tilde{N}_1 = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22}$, para o caso do cisalhamento oscilatório simples. As soluções numéricas desta seção foram obtidas resolvendo-se a primeira e terceira equações do sistema (6.5) e posterior uso da equação (6.2), para a obtenção das componentes $\tilde{\sigma}_{11}$ e $\tilde{\sigma}_{22}$ do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$. Inicialmente considere novamente a equação (6.17), que mostra a solução de \tilde{N}_1 no limite assintótico $De \ll 1$, a saber:

$$\tilde{N}_1(\tilde{t}) = \frac{3}{2} \frac{De^2 \phi}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} + \frac{3}{4} \frac{\phi De^2 (2 - \tilde{\omega}^2)}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \cos(2\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{9}{4} \frac{\phi De^2 \tilde{\omega}}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \sin(2\tilde{\omega}\tilde{t}). \quad (6.27)$$

Como no caso do cisalhamento simples permanente, temos que \tilde{N}_1 escala com De^2 já no limite assintótico $De \ll 1$. Mais importante, tem-se que a suspensão viscoelástica apresenta resposta na frequência $2\tilde{\omega}$, uma vez sendo excitada na frequência $\tilde{\omega}$.

A fim de validar nossa solução assintótica (6.27), é mostrado na figura (6.14) o caso particular no qual fixamos $\tilde{\omega} = 1$ e $De = 0.1$. Desta maneira, pode-se considerar a equação (6.27) reduzida a:

$$\frac{\tilde{N}_1(\tilde{t})}{\phi De^2} = \frac{3}{10} + \frac{3}{40} \cos(2\tilde{t}) + \frac{9}{40} \sin(2\tilde{t}). \quad (6.28)$$

Pela figura (6.14) verifica-se uma excelente concordância entre a solução assintótica dada agora pela equação (6.28) e a solução numérica dada pela integração numérica das equações (6.2) e (6.3). O perfil periódico harmônico visto na figura (6.14) nos induz a pensar que trata-se de um regime viscoelástico linear. Todavia, nos diagramas de fase a seguir será visto que existe efeitos não-lineares associados.

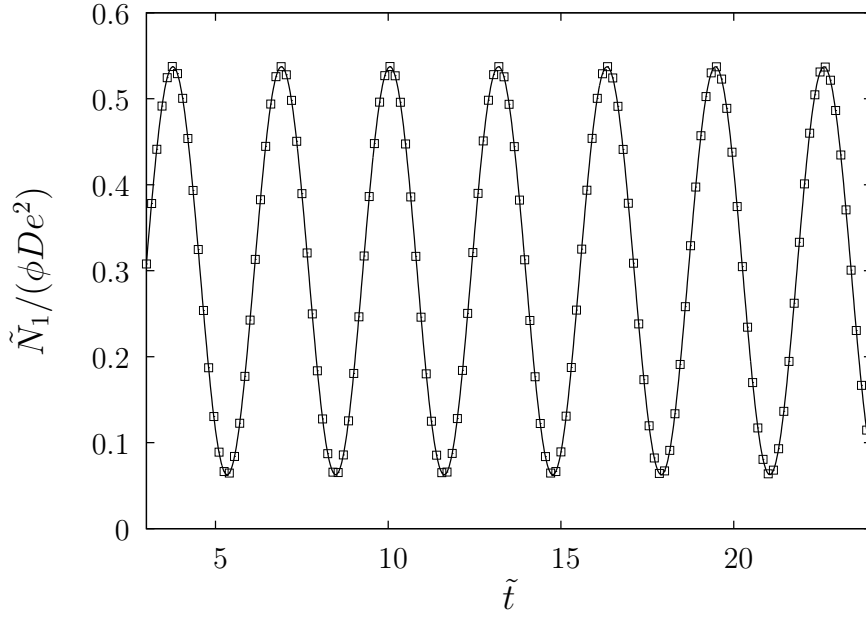
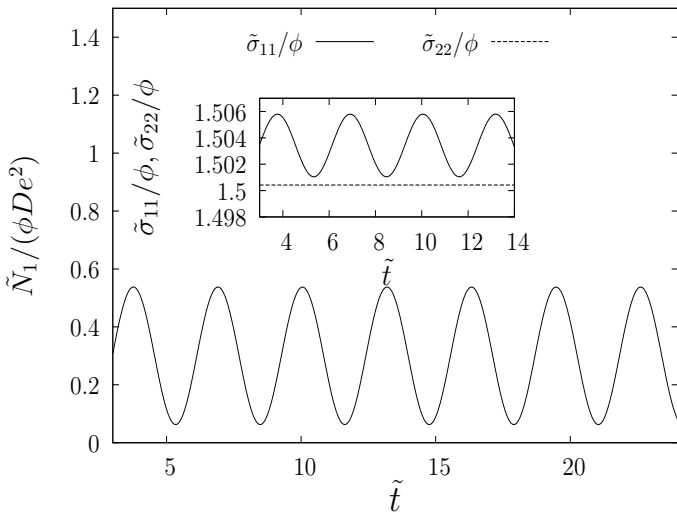
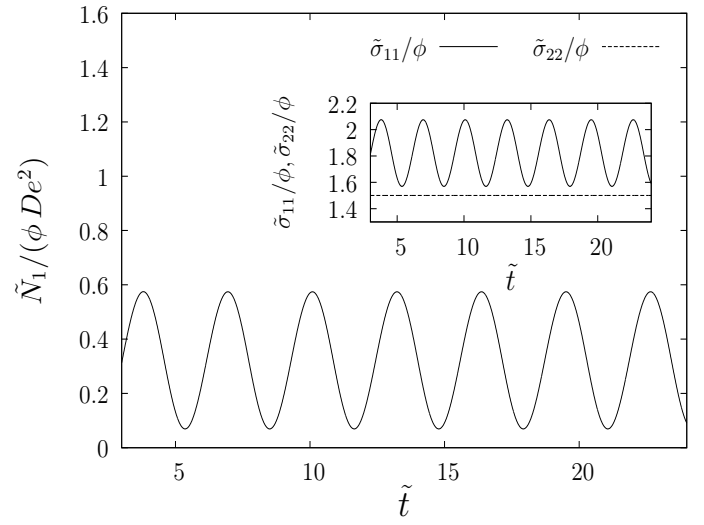


Figura 6.14: Primeira diferença de tensões normais adimensional $\tilde{N}_1/(\phi De^2)$ em função do tempo adimensional \tilde{t} . Os quadrados abertos denotam a solução numérica e a linha contínua representa a solução assintótica dada pela equação (6.28). Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $L = 60$, $De = 0.1$ e $\tilde{\omega} = 1$.

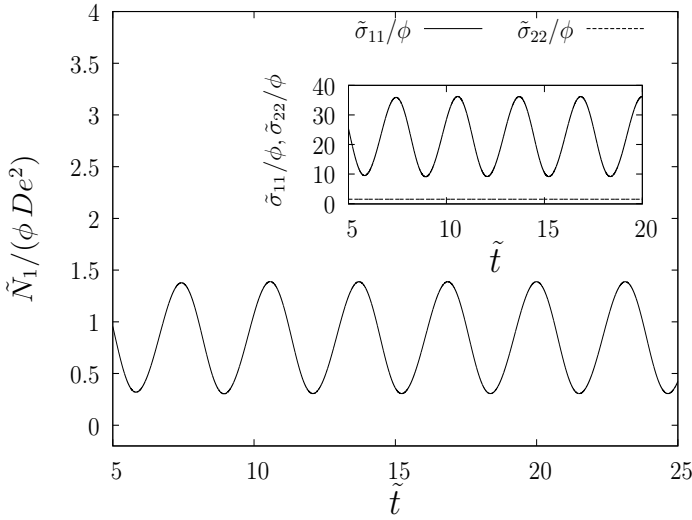
A figura (6.15) mostra a solução numérica do comportamento da primeira diferença de tensão normal adimensional $\tilde{N}_1/(\phi De^2)$ em função do tempo adimensional \tilde{t} para vários valores do parâmetro De e com $\tilde{\omega} = 1$ fixo para todos os casos examinados. Mostra-se novamente no gráfico (a) o caso $De = 0.1$, pelo qual pode-se observar que $\tilde{N}_1 = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22} \approx 0$, isto é, $\tilde{\sigma}_{11} \approx \tilde{\sigma}_{22}$. Porém, perceba no encarte deste caso que $\tilde{\sigma}_{11}$ e $\tilde{\sigma}_{22}$ são ambos diferentes de zero e que $\tilde{\sigma}_{22}/\phi$ possui valor constante igual a $\tilde{\sigma}_{22}/\phi \approx 1.5$, como previsto na equação (6.8). É importante mencionar que $\tilde{\sigma}_{11}$ sendo aproximadamente igual a $\tilde{\sigma}_{22}$ indica a inexistência de anisotropia de tensões normais. Em outras palavras, para $De = 0.1$ os efeitos não lineares relativos às diferenças de tensões normais são praticamente inexistentes.



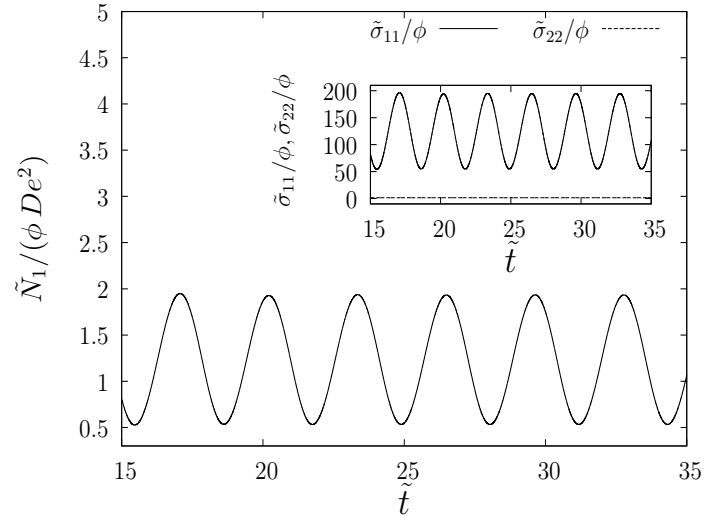
(a) $De = 0.1$



(b) $De = 1$



(c) $De = 5$



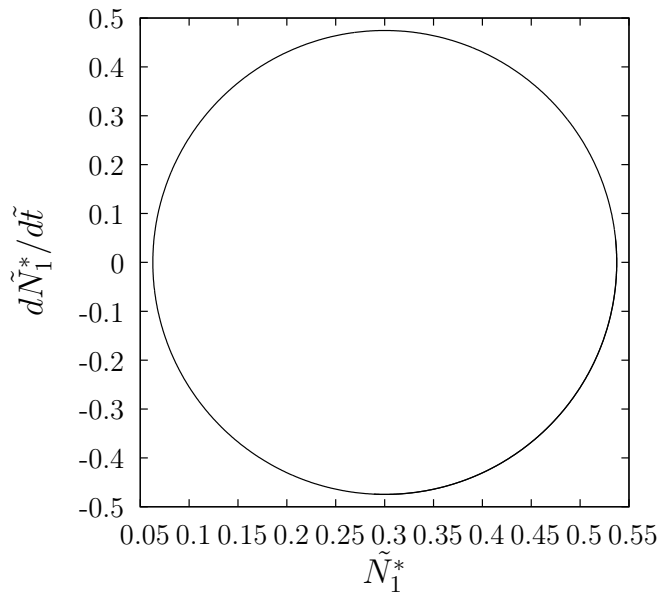
(d) $De = 10$

Figura 6.15: Primeira diferença de tensões normais adimensional $\tilde{N}_1/(\phi De^2)$ em função do tempo adimensional \tilde{t} para vários valores do parâmetro De . Em (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Nos encartes vemos a variação temporal das tensões normais $\tilde{\sigma}_{11}/\phi$ e $\tilde{\sigma}_{22}/\phi$ para cada De simulado. Parâmetros: $\tilde{\omega} = 1$, $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

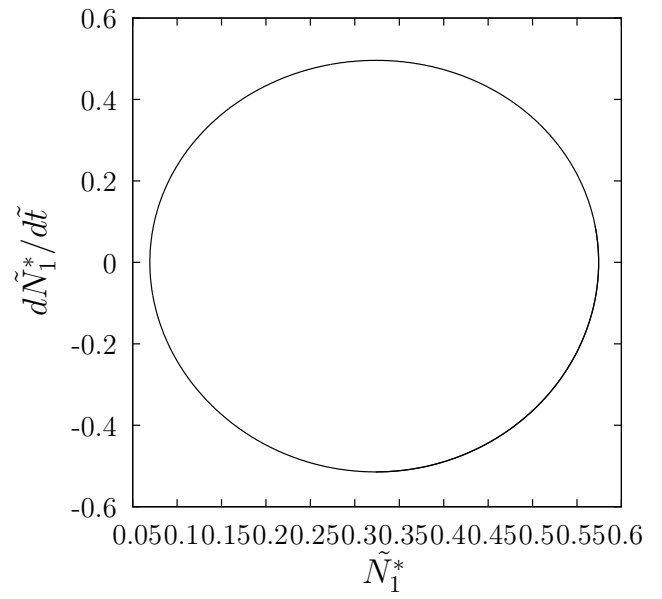
Ainda com relação à figura (6.15), nos gráficos (b), (c) e (d) verifica-se um aumento mais acentuado da magnitude de oscilação de $\tilde{N}_1/(\phi De^2)$ e o aparecimento de efeitos anisotropicos devido o estiramento da macromolécula produzido pelo escoamento. A referida anisotropia das macromoléculas gera anisotropia de tensões produzindo um aumento da tensão normal na direção 11, isto é, do aumento da tensão $\tilde{\sigma}_{11}$, correspondendo à tensão na direção na qual a macromolécula é estirada pela ação do escoamento. Isto pode ser interpretado como uma resposta elástica não linear mais evidente do fluido. Destaca-se que nestes três gráficos (b),(c) e (d), ainda se tem $\sigma_{22}/\phi \approx 1.5$, o que nos mostra que mesmo para maiores valores de De , o estiramento das macromoléculas ocorre somente na direção 11.

Na figura (6.16) apresenta-se os diagramas de fase⁴ da função $\tilde{N}_1^* = \tilde{N}_1(\tilde{t})/(\phi De^2)$, plotados numa escala quadrada. Estes gráficos tratam da comparação da derivada temporal de \tilde{N}_1^* com o próprio \tilde{N}_1^* , isto é, da comparação $d\tilde{N}_1^*/d\tilde{t} \times \tilde{N}_1^*$, para um período de oscilação temporal completo de \tilde{N}_1^* . Vê-se que a medida que o número de Deborah aumenta tem-se uma mudança na forma dos referidos diagramas de fase. Note que para $De = 0.1$ tem-se um diagrama de fase quase circular, na verdade com alguma distorção (elíptico), o que já indica a presença de efeitos não-lineares mesmo para $De = 0.1$, pois como se vê na equação (6.27), \tilde{N}_1 já é não linear com De mesmo quando $De \ll 1$, [4]. Para $De = 1$ tem-se um diagrama com maior distorção, sendo mais elíptico o que já indica uma não linearidade na resposta da suspensão polimérica. Para $De = 5$ e 10 , a não linearidade do sistema torna-se ainda mais evidente.

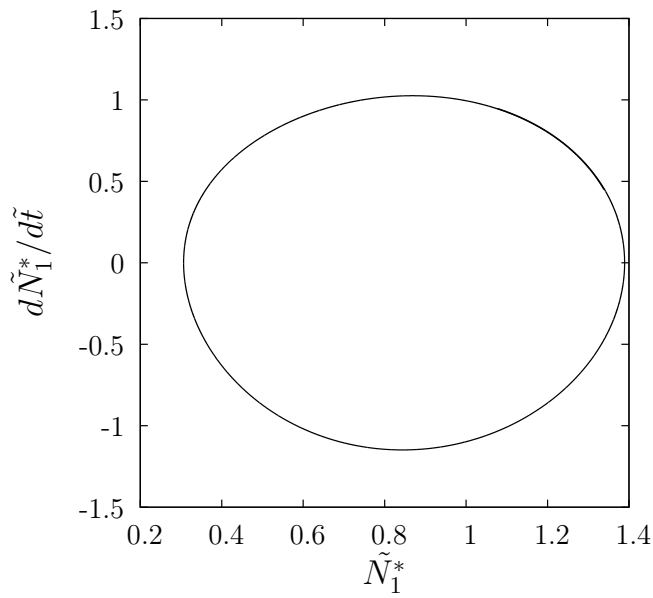
⁴Aqui usa-se o asterisco * em \tilde{N}_1 por conveniência na hora de nomear o eixo y na figura (6.16).



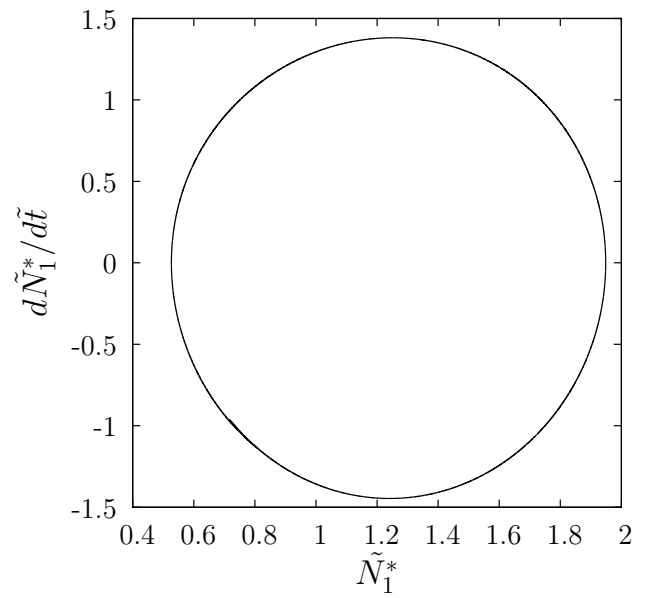
(a) $De = 0.1$



(b) $De = 1$



(c) $De = 5$



(d) $De = 10$

Figura 6.16: Diagramas de fase da função $\tilde{N}_1^* = \tilde{N}_1(\tilde{t})/(\phi De^2)$ para vários valores do número de Deborah. Em: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$.

Na figura (6.17) tem-se representado a média⁵ da primeira diferença de tensões normais adimensional \tilde{N}_1 em função do número de De para a frequência fundamental $\tilde{\omega} = 1$ fixa. Nesta figura percebe-se um comportamento semelhante a variação de \tilde{N}_1 visto na figura (5.2). Ainda tem-se um comportamento parabólico da média $\overline{\tilde{N}_1}$ para $De < 2$, porém nota-se no encarte da figura (6.17) que $\overline{\tilde{N}_1} \approx 0$ para $0 \leq De \leq 1$. Para $0 \leq De \leq 5$ tem-se que os dados numéricos foram bem ajustados pela função $f(De) = aDe^2 + bDe^4$, representada na linha pontilhada. Assim, para maiores valores de De a dependência quadrática foi perdida, necessitando agora também do termo $\mathcal{O}(De^4)$. Este resultado nos mostra que no cisalhamento simples oscilatório é necessário um maior número de De , quando comparado com o cisalhamento simples, para fazer surgir os efeitos anisotrópicos das macromoléculas com maior intensidade.

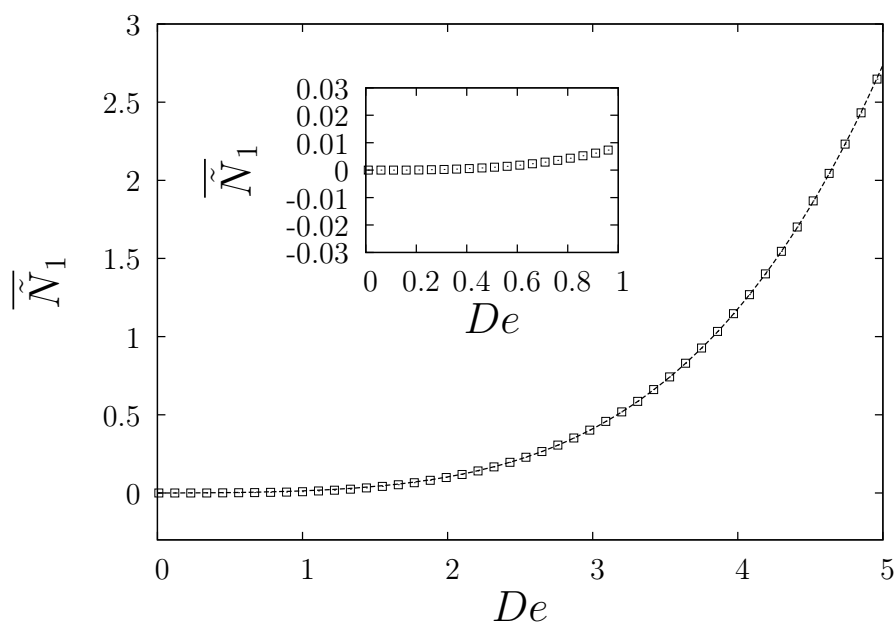


Figura 6.17: Média da primeira diferença de tensões normais adimensional, $\langle \tilde{N}_1 \rangle$, em função do número de De , para o cisalhamento simples oscilatório. Para cada De foi obtida a média temporal da função \tilde{N}_1 para a frequência $\tilde{\omega} = 1$ fixa. A linha pontilhada trata do ajuste dado pela função: $f(De) = aDe^2 + bDe^4$, com $a = 0.0097$ e $b = 0.004$. Parâmetros $\phi = 400$ ppm, $L = 60$ e $\tilde{\omega} = 1$.

⁵Média integral = $\overline{\tilde{N}_1} = \frac{1}{T} \int_0^T \tilde{N}_1(\tilde{t}) d\tilde{t}$.

A partir de agora faz-se um estudo da primeira diferença de tensões normais adimensional $\tilde{N}_1(\tilde{t}, \tilde{\omega})$ em função da frequência adimensional $\tilde{\omega}$ variando no intervalo $[10^{-2}, 10^2]$. Serão examinados os módulos viscoelásticos em fase e fora de fase com a excitação, $\dot{\gamma}(\tilde{t}) = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$, desta função para o limite assintótico dado pela já conhecida equação (6.27), a qual transcre-se novamente abaixo:

$$\tilde{N}_1(\tilde{t}, \tilde{\omega}) = \frac{3}{2} \frac{De^2 \phi}{(\tilde{\omega}^2 + 4)} + \frac{3}{4} \frac{\phi De^2 (2 - \tilde{\omega}^2)}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \cos(2\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{9}{4} \frac{\phi De^2 \tilde{\omega}}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \sin(2\tilde{\omega}\tilde{t}). \quad (6.29)$$

Serão fixados os parâmetros De e ϕ , donde pode-se reescrever a equação (6.29) apenas como sendo:

$$\tilde{N}_1^* = \frac{\tilde{N}_1(\tilde{t}, \tilde{\omega})}{\phi De^2} = \frac{3}{2(\tilde{\omega}^2 + 4)} + \frac{3}{4} \frac{(2 - \tilde{\omega}^2)}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \cos(2\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{9}{4} \frac{\tilde{\omega}}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)} \sin(2\tilde{\omega}\tilde{t}). \quad (6.30)$$

Da equação (6.30) extrai-se a seguinte expressão para o módulo viscoelástico em fase com a excitação de \tilde{N}_1^* , dada pela equação:

$$\tilde{\beta}'(\tilde{\omega}) = \frac{3}{4} \frac{(2 - \tilde{\omega}^2)}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)}. \quad (6.31)$$

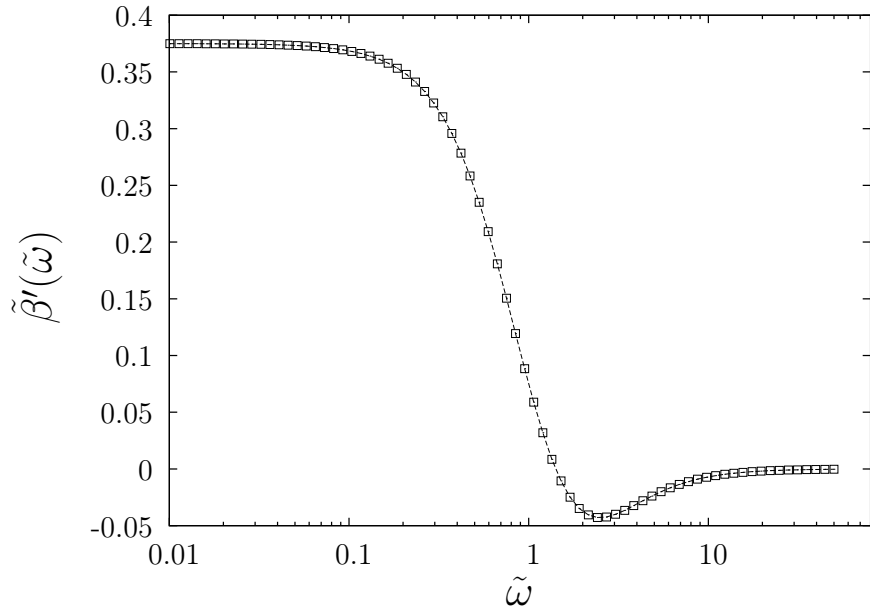
Extrai-se, também, a expressão analítica-assintótica ($De \ll 1$) para o módulo viscoelástico fora de fase com a excitação de \tilde{N}_1^* , o qual será dado por:

$$\tilde{\beta}''(\tilde{\omega}) = \frac{9}{4} \frac{\tilde{\omega}}{(\tilde{\omega}^2 + 4)(\tilde{\omega}^2 + 1)}. \quad (6.32)$$

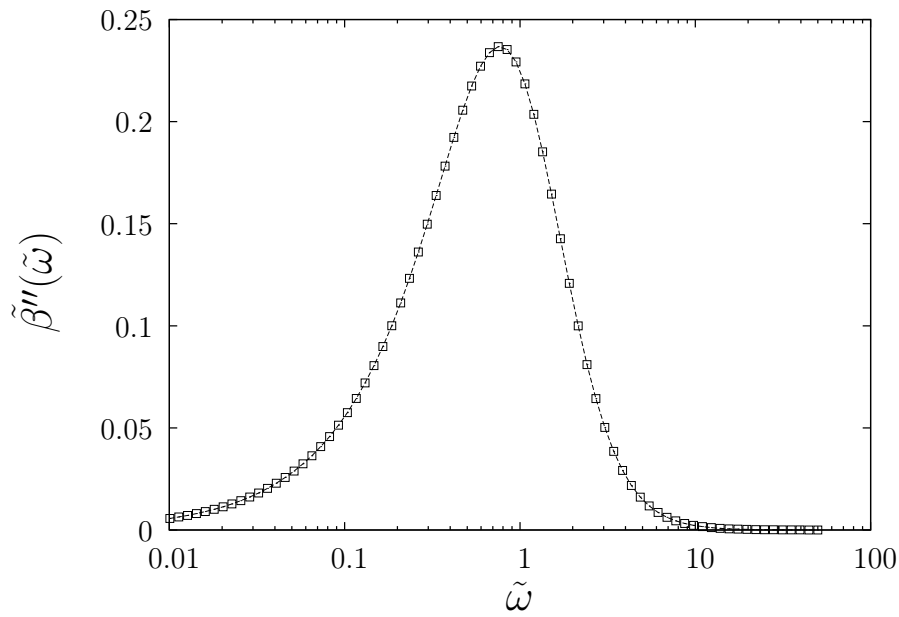
Vale destacar que a solução numérica apresentada na figura (6.18) foi obtida pela aplicação da DFT ao sinal temporal da equação (6.30) para $\tilde{\omega}$ variando no intervalo $[10^{-2}, 10^2]$ e $De = 0.1$ fixo. Perceba-se uma ligeira similaridade entre os gráficos da figura (6.18) e os gráficos da figura (6.9). No entanto, tem-se aqui uma variação menor no eixo y em ambos os gráficos. Em particular $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega}) < 0$ para $\tilde{\omega} > \sqrt{2}$ e $\tilde{\beta}''(\tilde{\omega}) > 0$ para todo $\tilde{\omega}$.

A figura (6.18)(a) apresenta o comportamento do módulo em fase β' em função da frequência para $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$. Observa-se que em baixas frequências o módulo β' corresponde a um platô enquanto para frequências $\tilde{\omega} \approx 1$, verifica-se uma diminuição de β' com $\tilde{\omega}$. Em altas frequências quando o fluido não responde responde a excitação do escoamento β' atinge um platô inferior em que $\beta' = 0$.

Por outro lado o comportamento de β'' na figura (6.18)(b) se assemelha ao de η'' em um fluido de Maxwell. Já que a curva vai para zero em baixas e altas frequências e apresenta um ponto de máximo nas vizinhanças de $\tilde{\omega} = 1$.



(a) $\tilde{\beta}'$

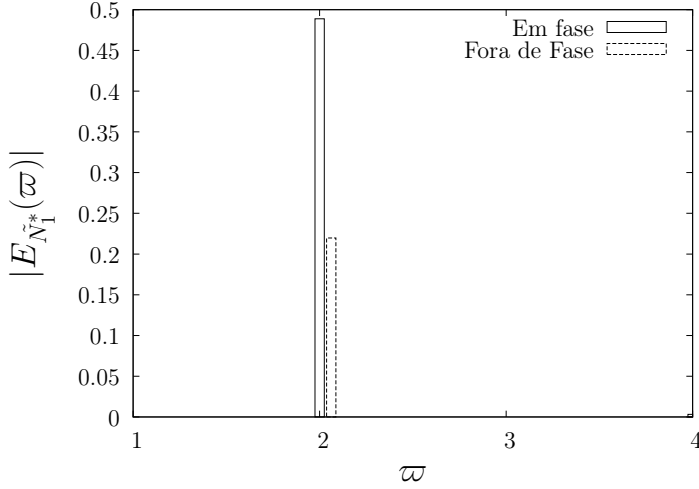


(b) $\tilde{\beta}''$

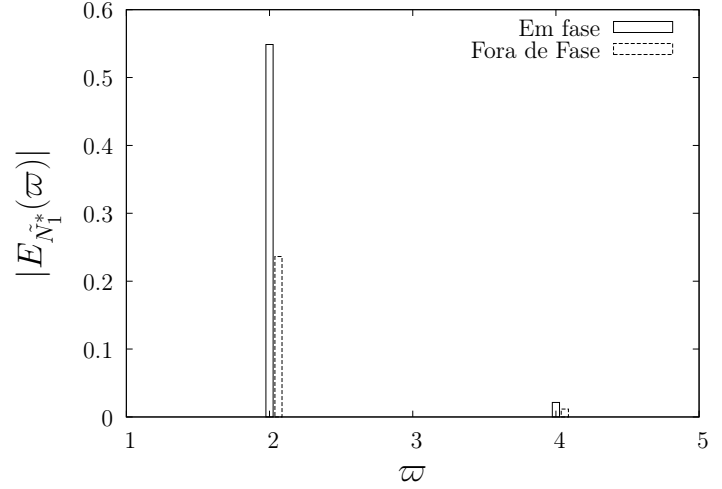
Figura 6.18: Módulos viscoelásticos β' e β'' da função \tilde{N}_1^* . Em (a), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica do coeficiente viscoelástico em fase com a excitação, $\tilde{\beta}'$, na linha pontilhada tem-se a solução assintótica dada pela equação (6.31). Em (b), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica do coeficiente viscoelástico fora de fase com a excitação, $\tilde{\beta}''$, e na linha pontilhada tem-se a solução assintótica dada pela equação (6.32). Parâmetros: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400$ ppm.

Determina-se também os espectros de potência $E_{\tilde{N}_1^*(\varpi)}$ da primeira diferença de tensões normais $\tilde{N}_1^* = \tilde{N}_1/(\phi De^2)$ a fim de se percorrer o caminho do surgimento dos efeitos não-lineares da série temporal de \tilde{N}_1^* . Para o cálculo destes espectros é aplicado novamente a DFT ao sinal temporal gerado pela equação (6.29), agora para $\tilde{\omega} = 1$ fixo e diferentes valores do parâmetro De . Em seguida, é observado a resposta na frequência $\varpi = 2\tilde{\omega} = 2$ e na(s) múltipla(s) desta. No gráfico da figura (6.19)(a) nota-se o caso quase linear ($De = 0.1$) para os valores de $E_{\tilde{N}_1^*(\varpi)}$ de onde pode-se verificar a resposta na frequência fundamental de excitação $\varpi = 2 = 2\tilde{\omega}$, como previsto pela equação (6.29). A resposta na frequência $\varpi = 4$ foi muito pequena, imperceptível nesta escala, o que mostra que o valor de $De = 0.1$ ainda é muito baixo para produzir uma perda da linearidade do sistema de forma significativa, como se verá ainda no diagrama de fase mostrado na figura (6.16)(a).

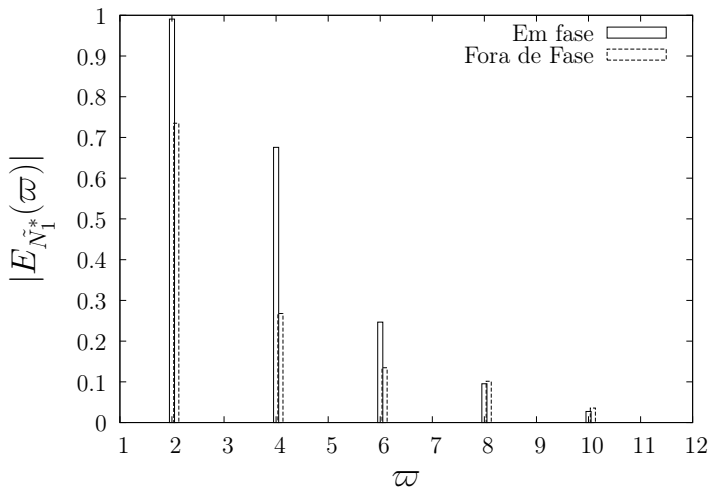
Na figura (6.19)(b) tem-se o caso $De = 1$ no qual já se percebe a presença (mesmo que pequena) da resposta no segundo harmônico $\varpi = 4$. Para escoamentos mais intensos, como nos casos (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$, da figura (6.19), percebe-se de forma ainda mais evidente a perda da linearidade da resposta de \tilde{N}_1^* . Nestes dois últimos casos temos a resposta no harmônico fundamental $\varpi = 2$ com maior magnitude, bem como respostas em outros harmônicos de ordem superior, agora com valores também mais significativos. Estes resultados mostram mais uma vez que para escoamentos mais intensos estiramento das macromoléculas provoca o surgimento de efeitos anisotrópicos e, conseqüentemente, diferenças de tensões normais.



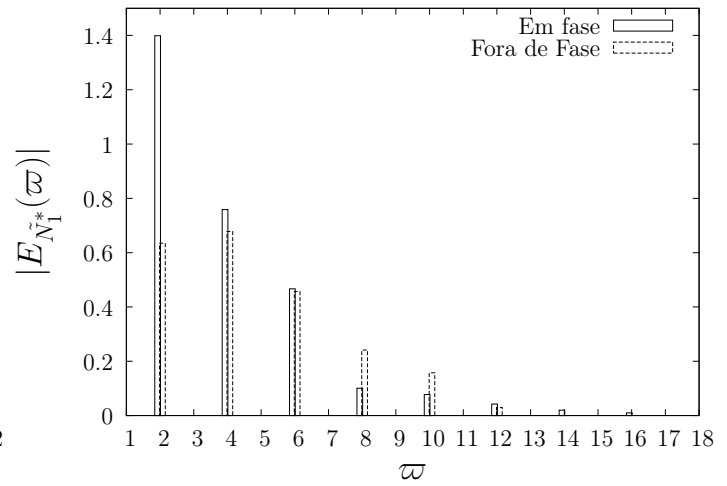
(a) $De = 0.1$



(b) $De = 1$



(c) $De = 5$



(d) $De = 10$

Figura 6.19: Módulo dos espectros de potência em fase e fora de fase da primeira diferença de tensões normais adimensional, $E_{\tilde{N}_1^*}(\varpi)$. Aqui $\tilde{N}_1^* = \tilde{N}_1(\tilde{t})/(\phi De^2)$ para: (a) $De = 0.1$, (b) $De = 1$, (c) $De = 5$ e (d) $De = 10$. Parâmetros: $\tilde{\omega} = 1$, $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

Para encerrar esta seção, é apresentado o resultado do estudo realizado afim de se estimar o valor do parâmetro De ao qual os erros relativos da resposta numérica do sinal de \tilde{N}_1 é superior a um por cento. Para este fim fixa-se o valor⁶ de $\tilde{\omega} = 0.055$ e varia-se o parâmetro De . Em seguida, se analisa o comportamento da variação do módulo em fase $\tilde{\beta}'$ dado pela equação (6.31). Escolheu-se o valor $\tilde{\omega} = 0.055$ e o estudo do módulo $\tilde{\beta}'$, por esta função ser praticamente constante nas vizinhanças de $\tilde{\omega} = 0.055$.

Na tabela (6.2) tem-se os valores de $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ para vários valores do parâmetro De^2 bem como o módulo do erro relativo entre os valores consecutivos de $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ a medida que se aumenta De . Observa-se que para $De > 0.5$ tem-se um erro relativo maior que um por cento entre os valores consecutivos de $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$. Portanto, estima-se que seja em torno de $De \approx 0.55$ que a primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 , para o cisalhamento oscilatório, já apresente um regime não linear ainda mais evidente, isto é, a solução assintótica dada pela equação (6.29) já não será mais válida para $De \approx 0.55$ com \tilde{N}_1 fornecendo um erro relativo menor que um por cento. Consequentemente, seriam necessários termos de ordens De^4 e/ou De^6 para se representar \tilde{N}_1 com acurácia [4]. É instrutivo notar que o valor, $De \approx 0.55$, é maior do que aquele encontrado para o cisalhamento simples visto na seção (5.3.3). Naquele contexto foi estimado que $De \approx 0.25$. Portanto, no cisalhamento oscilatório, as macromoléculas do fluido necessitam de um escoamento mais intenso, antes de deixar seu limite assintótico dado pela equação (6.17).

Tabela 6.2: Alguns valores de $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ e os erros relativos associados.

| De^2 | $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ | Erro Relativo |
|------------|--|---------------|
| 1.000E-004 | 0.372625 | – |
| 3.600E-003 | 0.372640 | 0.004% |
| 2.250E-002 | 0.374004 | 0.366% |
| 0.2025 | 0.375443 | 0.384% |
| 0.2500 | 0.388571 | 0.811% |
| 0.6400 | 0.395253 | 1.176% |

⁶Aqui 0.055 é o ponto médio entre 0.01 e 0.1. Veja figura (6.18)(a)

Na figura (6.20) tem-se apresentado o comportamento de $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ em função de De^2 bem como de um ajuste polinomial de $\mathcal{O}(De^{10})$.

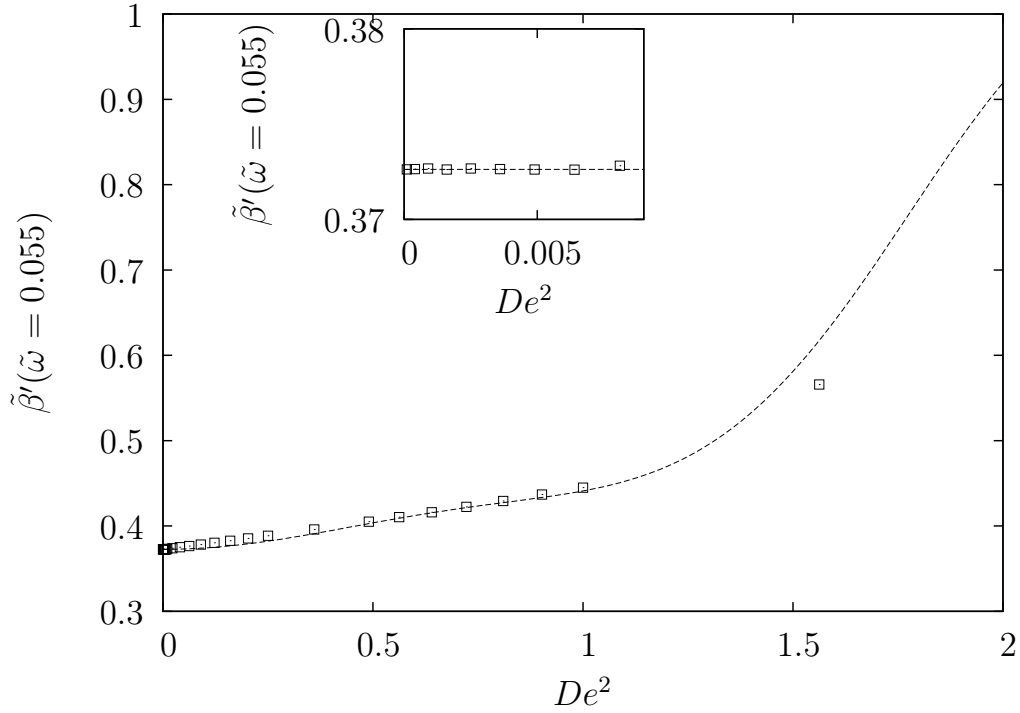


Figura 6.20: Módulo viscoelástico em fase $\tilde{\beta}'(\tilde{\omega} = 0.055)$ da primeira diferença de tensões normais em função do parâmetro De^2 . Os quadrados abertos representam os valores numéricos para vários De^2 , a linha pontilhada denota o ajuste polinomial dado por: $f(De) = 0.373 + aDe^2 + bDe^4 + cDe^6 + dDe^8 + eDe^{10}$, em que $a = 0.165426$, $b = -0.193736$, $c = 0.121118$, $d = -0.0262297$ e $e = 0.00190248$. No encarte, pode-se ver, em detalhes, o comportamento de $\tilde{\beta}'$ para $De \ll 1$. O módulo em fase $\tilde{\beta}'$ é praticamente constante para $De \ll 1$ e aproximadamente igual a 0.373.

6.1.7 Função Relaxação de Tensão $\Phi(s)$ no regime viscoelástico linear e não-linear

A fim de enfatizar que o fluido em questão se comporta como um fluido de Maxwell, como se definiu na seção (2.11), irá se determinar nesta seção a função relaxação de tensão $\Phi(s)$ através das transformadas de Fourier seno e cosseno, como apresentadas na equação (2.132), no caso do escoamento oscilatório. Em particular examina-se, também, o espectro de tempo de relaxação de Maxwell da função Φ , quando o parâmetro De é aumentado (equação (2.165)).

A título de comodidade transcreve-se a equação (2.132) a seguir

$$\Phi(s) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \eta'(\omega) \cos(\omega s) d\omega \quad \text{e} \quad \Phi(s) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \eta''(\omega) \sin(\omega s) d\omega. \quad (6.33)$$

Como visto na seção (2.11) a função $\Phi(s)$ pode ser vista como um fator multiplicativo da tensão no modelo de viscoelasticidade linear de Maxwell, dado pela equação (2.127) transcrita abaixo

$$\sigma(t) = \frac{\eta_1}{\alpha_1} \int_{-\infty}^t \exp(-(t-t')/\alpha_1) \dot{\gamma} dt' = \frac{\eta_1}{\alpha_1} \int_0^{+\infty} \exp(-s/\alpha_1) \dot{\gamma} ds. \quad (6.34)$$

Portanto, por definição:

$$\Phi(s) = \frac{\eta_1}{\alpha_1} \exp(-s/\alpha_1), \quad (6.35)$$

representa a função relaxação de tensão do modelo de Maxwell com $s = s(t') = t - t'$ e $\dot{\gamma}(t)$ como antes é a taxa de cisalhamento do escoamento oscilatório.

É importante ressaltar que a função Φ será adimensionalizada tendo-se por base o tempo de relaxação principal do fluido τ_p e a viscosidade do fluido base μ . Deste modo, tem-se

$$\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \Phi(s/\tau_p) \frac{\tau_p}{\mu} = \frac{\tilde{\eta}_1}{\tilde{\alpha}_1} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_1), \quad (6.36)$$

em que $\tilde{\eta}_1 = \eta_1/\mu$ e $\tilde{\alpha}_1 = \alpha_1/\tau_p$ são agora parâmetros adimensionais. É instrutivo destacar, novamente, que o tempo de relaxação principal τ_p é definido como o maior tempo de relaxação, representando o mecanismo principal de interação entre as macromoléculas. A este tempo τ_p se seguem diversos outros tempos de relaxação secundários, aos quais está associado o término do processo de relaxação da tensão, ou seja, o retorno do material a sua condição não deformada.

O cálculo da função $\tilde{\Phi}$ por meio das equações em (6.33) é possível uma vez que já se tem os valores⁷ numéricos adimensionais dos módulos viscoelásticos $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e $\tilde{\eta}''/\phi$ obtidos na seção (6.1.3) para a figura (6.9), no regime de pequenas deformações com $De = 0.1$, para o cisalhamento simples oscilatório. Com estes valores de $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e $\tilde{\eta}''/\phi$ apresenta-se na figura (6.21) a função $\Phi(s)$ adimensional obtida via integração numérica da equação (6.33), para os dois casos da transformada de Fourier. Nota-se que o comportamento de Φ se enquadra perfeitamente no modelo viscoelástico linear de Maxwell, dado pela equação (6.36), visto que foi necessário apenas de um tempo de relaxação adimensional para ajustar os resultados numéricos na figura (6.21). Perceba, por fim, que existe uma boa concordância qualitativa com o gráfico da figura (3.12), obtida de dados experimentais.

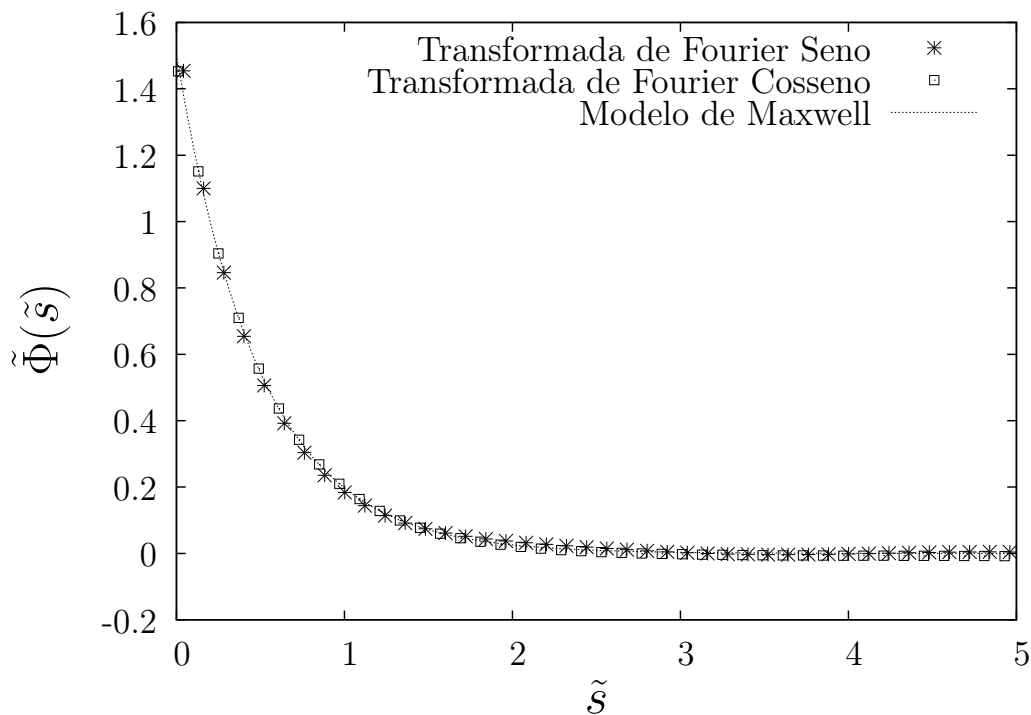


Figura 6.21: Resultados numéricos da Função relaxação de tensão $\tilde{\Phi}(\tilde{s})$ obtida pelas transformadas de Fourier seno (*) e cosseno (□). Na linha pontilhada temos o ajuste feito com um elemento de Maxwell, dado pela equação (6.36), e obteve-se: $\tilde{\eta}_1 = 0.7398$; $\tilde{\alpha}_1 = 0.4923$. Parâmetros utilizados: $De = 0.1$, $L = 60$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\phi = 400$ ppm.

⁷Na verdade basta apenas um dos módulos, mas determinamos Φ utilizando-se dos dois módulos η' e η'' .

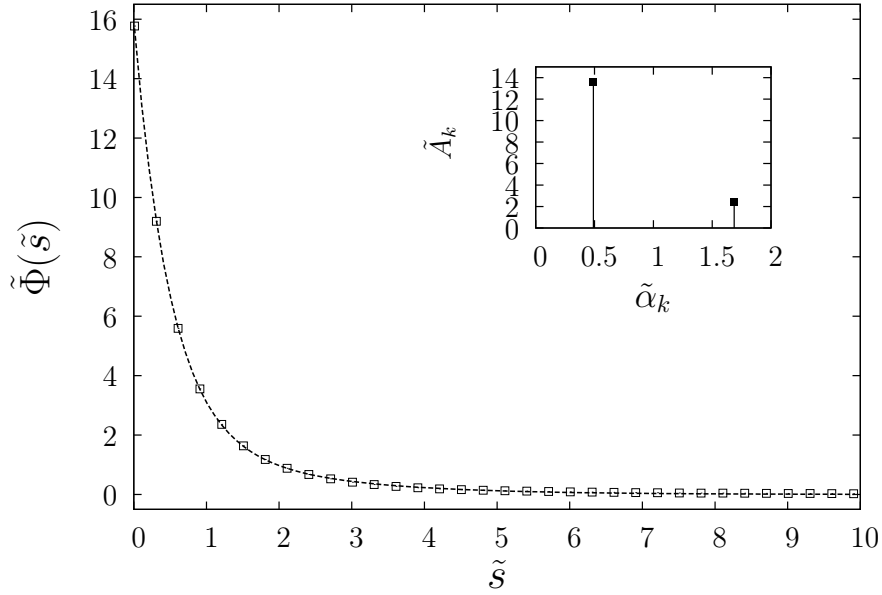
O comportamento da função relaxação de tensão Φ no regime não-linear, é apresentada na figura (6.22). Na referida figura, a função relaxação de tensão adimensional $\tilde{\Phi}$ foi determinada para dois casos: (a) $De = 2$ e (b) $De = 3$, usando-se a transformada de Fourier cosseno do módulo viscoelástico adimensional $\tilde{\eta}'_r/\phi$, ambos os casos obtidos do cisalhamento oscilatório para $\tilde{\omega} = 1$. No gráfico (a) da figura (6.22) é mostrada a função $\tilde{\Phi}$ e o respectivo ajuste feito para dois elementos de Maxwell (ver equação (2.154)). E no gráfico (b) é apresentada a função $\tilde{\Phi}$ e o seu respectivo ajuste feito para três elementos de Maxwell. Deste modo percebe-se que para maiores valores do parâmetro De outros tempos de relaxação aparecem. Este fato confirma mais uma vez que, a medida que se deixa o regime de pequenas deformações ($De = 0.1$), para regimes de maiores deformações, $De = 2$ ou $De = 3$, tem-se a presença de efeitos não-lineares na resposta do fluido, mesmo para uma suspensão polimérica diluída ($\phi = 400 \text{ ppm}$ como é o caso), pelo simples fato da existência das macromoléculas no fluido que em regimes de escoamentos mais intensos sofrerem um estiramento considerável e por isto injetam elasticidade na resposta da tensão.

Percebe-se ainda da figura (6.22) que existem espectros de tempos de relaxação maiores que outro(s), já que a amplitude de tensão se distribui de forma desigual entre os modos. Finalmente nota-se que no caso (b) $De = 3$ a tensão demora mais tempo para relaxar, uma vez que aqui tem-se uma deformação maior nas macromoléculas, o que faz com que as mesmas demorem mais a voltar para o estado de equilíbrio.

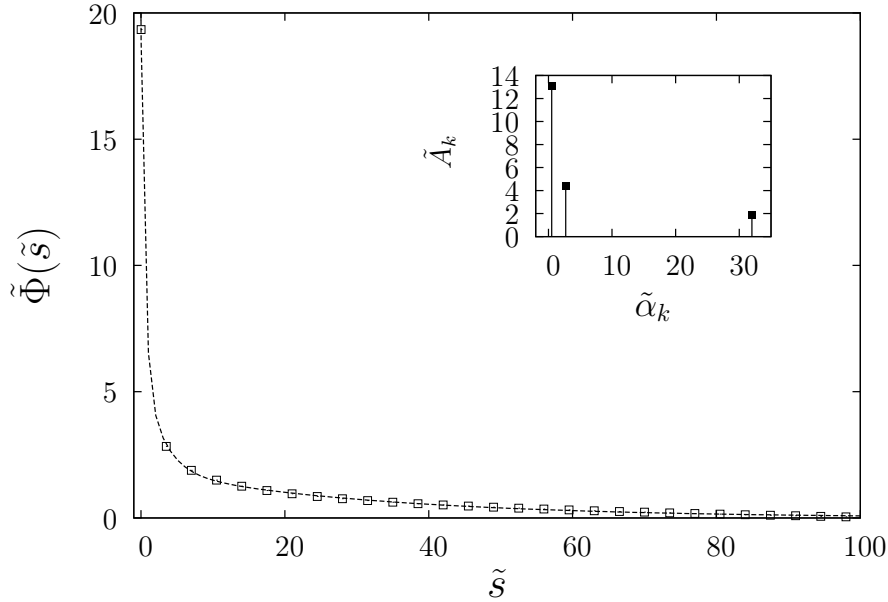
Para se entender melhor os encartes dos gráficos (a) e (b) da figura (6.22), transcreve-se a equação (2.165), que trata da função relaxação de tensão para N elementos de Maxwell, agora escrita em sua forma adimensional

$$\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \sum_{k=1}^N \tilde{A}_k \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_k), \quad (6.37)$$

onde $\tilde{A}_k = \tilde{\eta}'_k/\tilde{\alpha}_k$ é a k -ésima amplitude de tensão adimensional.



(a) $De = 2$



(b) $De = 3$

Figura 6.22: Função relaxação de tensão Φ no regime não linear. Em (a), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica de $\tilde{\Phi}$ para $De = 2$ e na linha pontilhada tem-se o ajuste com dois elementos de Maxwell, i.e., $\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \frac{\tilde{\eta}_1}{\tilde{\alpha}_1} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_1) + \frac{\tilde{\eta}_2}{\tilde{\alpha}_2} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_2)$, em que $\tilde{\eta}_1 = 4.11012$; $\tilde{\alpha}_1 = 1.68783$; $\tilde{\eta}_2 = 6.6435$; $\tilde{\alpha}_2 = 0.4905$. Em (b), nos quadrados abertos, tem-se a solução numérica de $\tilde{\Phi}$ para $De = 3$ e na linha pontilhada tem-se o ajuste com três elementos de Maxwell, i.e., $\tilde{\Phi}(\tilde{s}) = \frac{\tilde{\eta}_1}{\tilde{\alpha}_1} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_1) + \frac{\tilde{\eta}_2}{\tilde{\alpha}_2} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_2) + \frac{\tilde{\eta}_3}{\tilde{\alpha}_3} \exp(-\tilde{s}/\tilde{\alpha}_3)$, com $\tilde{\eta}_1 = 6.663$; $\tilde{\alpha}_1 = 0.508$; $\tilde{\eta}_2 = 11.948$; $\tilde{\alpha}_2 = 2.712$; $\tilde{\eta}_3 = 60.602$; $\tilde{\alpha}_3 = 31.995$.

6.1.8 Verificação das relações de Kramers-Kronig (K-K) – Princípio da Causa-Efeito

Encerra-se a seção do escoamento oscilatório transiente mostrando uma validação gráfica para as relações de Kramers-Kronig (K-K) [8].

Na seção (2.11) foi apresentada na equação (2.135) estas relações e a título de comodidade transcrevemo-as abaixo

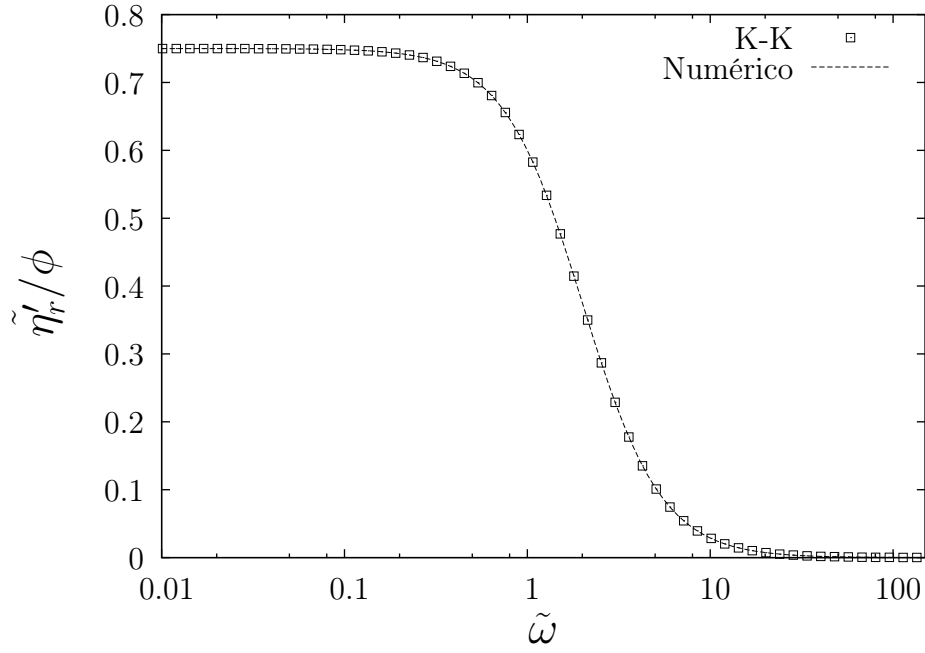
$$\eta''(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\eta'(x) - \eta'(\omega)}{x^2 - \omega^2} dx \quad \text{e} \quad \eta'(\omega) - \eta'(+\infty) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{x\eta''(x) - \omega\eta''(\omega)}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (6.38)$$

Note que para aplicação do par de equações (6.38) é necessário conhecer η' ou η'' . Por este motivo serão usados os dados numéricos da figura (6.9) na qual é apresentado uma comparação entre o limite assintótico e numérico para os módulos viscoelásticos η' e η'' . Vale lembrar que na figura (6.9) obteve-se as funções η' e η'' por meio da aplicação da DFT ao sinal temporal de $\sigma_{12}(\tilde{t})$ para vários valores de $\tilde{\omega}$ no intervalo $[10^{-2}, 10^2]$.

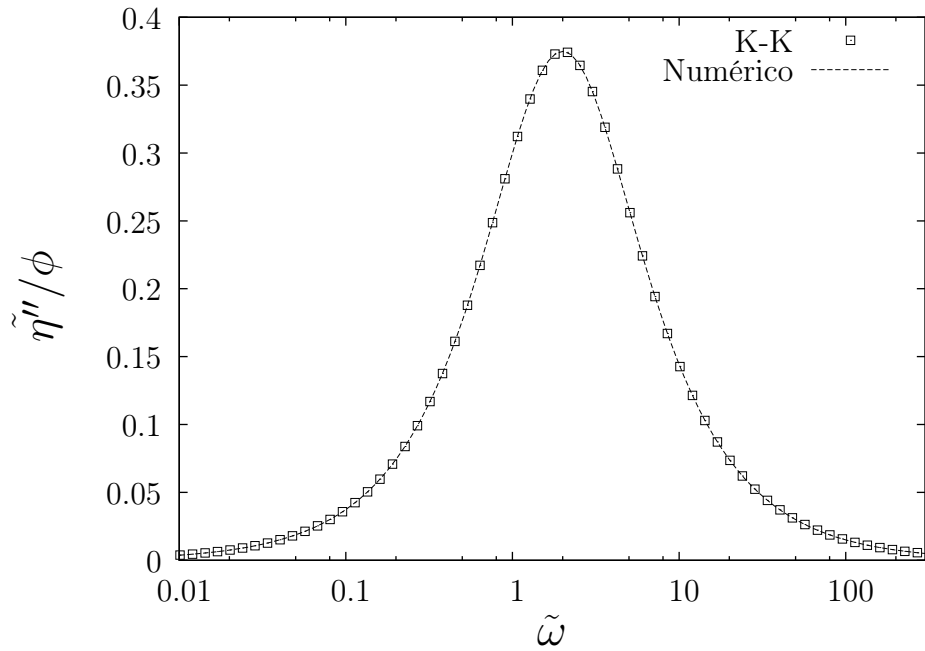
Na figura (6.23) abaixo tem-se o resultado da aplicação da equação (6.38) nos módulos η' e η'' . Na parte (a) da figura (6.23) mostra-se que conhecendo-se a função η'' é possível obter o módulo viscoso η' por meio da segunda equação de (6.38). Do mesmo modo, uma vez conhecida a função η' podemos calcular o módulo elástico η'' por meio da primeira equação de (6.38). Nos gráficos da figura (6.23) considera-se a solução numérica já obtida na figura (6.9), e para resolver as integrais que aparecem na equação (6.38) foi utilizado integração numérica via regra dos trapézios⁸. Uma última observação que se faz é que na equação (6.38) utiliza-se, na verdade, as funções $\tilde{\eta}'_r/\phi$ e $\tilde{\eta}''/\phi$ adimensionais, como de fato apresenta-se na figura (6.9).

Perceba que a equação (6.38) é uma boa ferramenta para se obter o módulo viscoso η' tendo conhecido o módulo elástico η'' e vice-versa, uma vez que a figura (6.23) é muito semelhante à figura (6.9). Esta relação dual é conhecida na literatura [8] como o princípio da causa-efeito, isto é, o par de equações (6.38), podendo ser aplicada apenas em regimes de viscoelasticidade linear, como é o caso da figura (6.23).

⁸Na equação (6.38) temos, na integral, que $0 \leq x < +\infty$, mas para a integração numérica foi utilizado apenas $0 \leq x \leq 500$, o que já se mostrou suficiente como pode ser visto na figura (6.23).



(a) Dado $\tilde{\eta}''/\phi$ encontra-se $\tilde{\eta}'/\phi$.



(b) Dado $\tilde{\eta}'/\phi$ encontra-se $\tilde{\eta}''/\phi$.

Figura 6.23: Utilização das relações de Kramers-Kronig (K-K) para obtenção dos módulos viscoelásticos η' e η'' em regime de viscoelasticidade linear. Em (a), na linha pontilhada, é dada a solução numérica de $\tilde{\eta}'/\phi$ e nos quadrados abertos tem-se o mesmo módulo obtido pela segunda equação de (6.38). Em (b), na linha pontilhada, é dada a solução numérica de $\tilde{\eta}''/\phi$ e nos quadrados abertos tem-se o mesmo módulo obtido pela primeira equação de (6.38). Parâmetros: $De = 0.1$, $L = 60$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

6.2 Frações Continuadas

Nesta seção explicita-se o algoritmo de frações continuadas [16],[20],[37] que serve como uma ferramenta para ajustar um conjunto de dados obtidos tanto experimentalmente como também por simulações numéricas. Considere o seguinte conjunto de dados $\{\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_p\}$ e $\{\eta'_0, \eta'_1, \dots, \eta'_p\}$ ou $\{\eta''_0, \eta''_1, \dots, \eta''_p\}$.

Este algoritmo pode ser aplicado para o ajuste de um conjunto formado por $p + 1$ frequências e os seus respectivos valores para η' ou η'' (ou ainda G' e G'').

Para o requerido ajuste defina-se, por exemplo para η' , a função:

$$\eta'_p(\omega) = \frac{A_p(\omega)}{B_p(\omega)}, \quad (6.39)$$

em que as funções $A_p(\omega)$ e $B_p(\omega)$ são dadas pelas seguintes relações recursivas [16]:

$$\begin{cases} A_{-1}(\omega) = 0 \text{ e } A_0(\omega) = \eta'_0, \\ B_{-1}(\omega) = 1 \text{ e } B_0(\omega) = 1, \\ A_{n+1}(\omega) = A_n(\omega) + (\omega - \omega_p)\alpha_{n+1}A_{n-1}, \\ B_{n+1}(\omega) = B_n(\omega) + (\omega - \omega_p)\alpha_{n+1}B_{n-1}, \\ \alpha_0 = \eta'_0 \text{ e } \alpha_1 = \frac{(\eta'_0/\eta'_1) - 1}{\omega_1 - \omega_0}. \end{cases} \quad (6.40)$$

Ressalta-se que a relação (6.40) ocorre para todo $n = 0, 1, \dots, p$. Para se determinar os coeficientes α_j , $j = 2, 3, \dots, p$, defina-se:

$$\alpha_j = \beta_j F_j, \quad \text{onde } \beta_j = (\omega_{j-1} - \omega_j)^{-1}, \quad (6.41)$$

com F_j sendo a seguinte fração continuada:

$$F_j = 1 + \frac{(\omega_j - \omega_{j-2})\alpha_{j-1}}{1 + \frac{\vdots}{1 + \frac{\vdots}{1 + \frac{\vdots}{1 + \frac{(\omega_j - \omega_0)\alpha_1}{1 - \left(\frac{\eta'_0}{\eta'_j}\right)}}}}}. \quad (6.42)$$

Conforme mencionado acima, para se fazer o ajuste é necessário uma sequência de dados experimentais ou de simulações numéricas. No presente trabalho, com a finalidade

de testar o método utiliza-se dados experimentais dimensionais,⁹ obtidos no laboratório de microhidrodinâmica e reologia do grupo do Vortex-UnB com uma suspensão de PAMA a $\phi = 400 \text{ ppm}$ por meio de um cisalhamento oscilatório transiente, de onde obteve-se os módulos viscoelásticos $\eta'(\omega)$ e $\eta''(\omega)$ mostrados na tabela (6.3).

A figura (6.24) mostra alguns pontos experimentais da tabela (6.3) e o ajuste feito por meio das frações continuadas das funções $\eta'(\omega)$ e $\eta''(\omega)$. Perceba que os dados obtidos experimentalmente são bem interpolados por tal processo iterativo descrito na equação (6.40). Nota-se ainda uma boa concordância qualitativa entre os gráficos da figura (6.24) e os gráficos da figura (3.10).

Destaca-se que para fazer o ajuste do η'' deve-se proceder com a seguinte mudança nas condições iniciais:

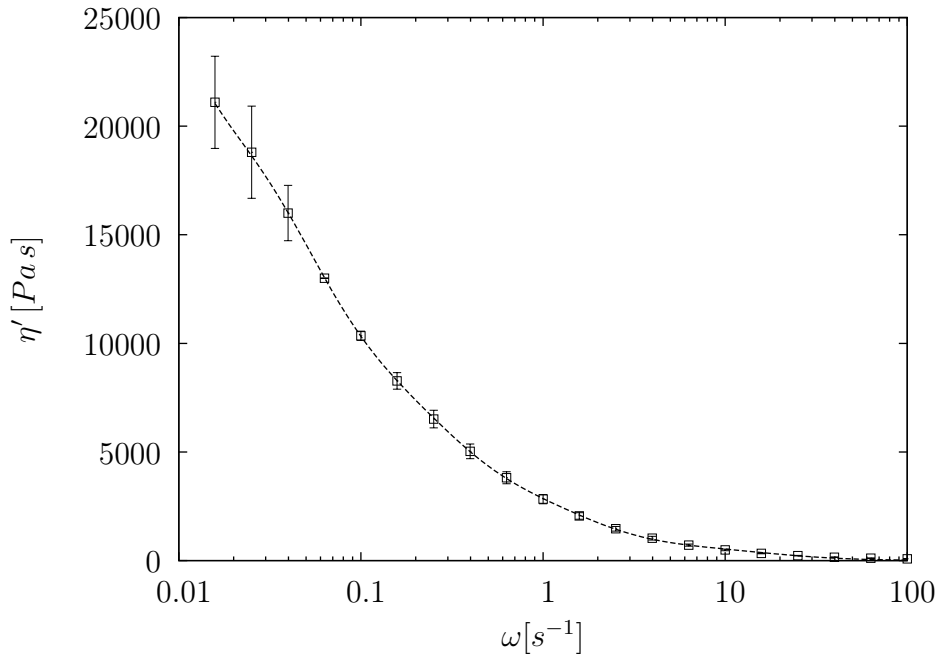
$$A_0(\omega) = \eta_0'', \quad \alpha_0 = \eta_0'' \quad \text{e} \quad \alpha_1 = \frac{(\eta_0''/\eta_1'') - 1}{\omega_1 - \omega_0}. \quad (6.43)$$

Dos resultados apresentados nesta seção é possível perceber que o ajuste por frações continuadas de pontos gerados experimentalmente ou por simulações numéricas é muito eficiente para uma descrição precisa dos módulos viscoelásticos, correspondendo ao regime de viscoelasticidade linear. Esta aplicação pode ser estendida a suspensões poliméricas mais concentradas, fluidos magnéticos entre outros com a percepção que mesmo em condição de viscoelasticidade linear esses fluidos apresentam respostas fora do padrão comportamental clássico de um fluido viscoelástico de Maxwell.

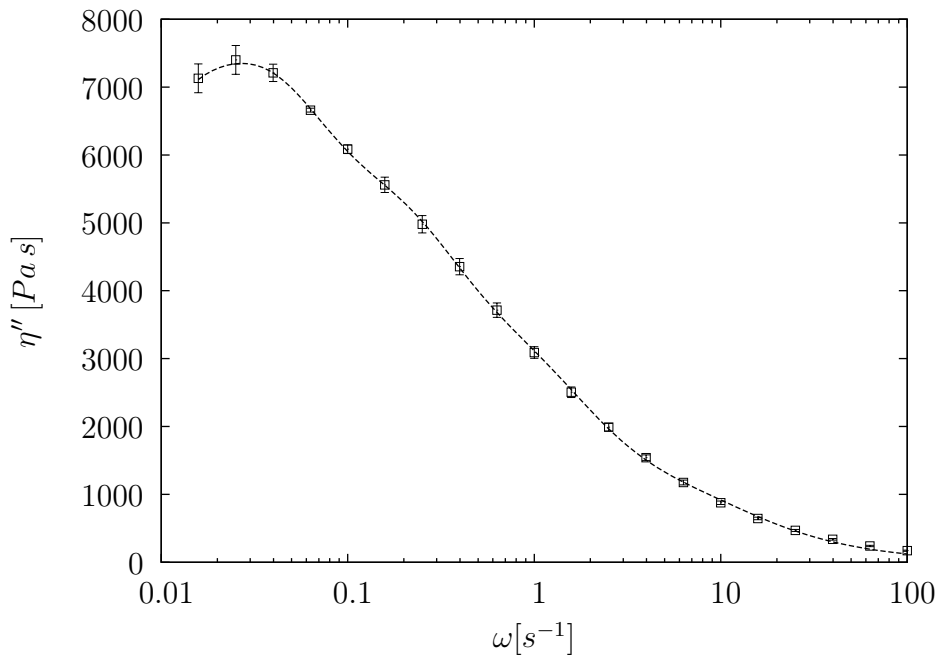
⁹Iremos trabalhar com os dados na forma dimensional uma vez se pretende fazer apenas um ajuste dos mesmos para verificar o método. Não sendo necessário trabalhar com as equações (6.2) e (6.3).

Tabela 6.3: Valor dos módulos viscoelásticos η' e η'' para várias frequências ω de uma suspensão diluída de PAMA com $\phi = 0.01$ obtidos experimentalmente.

| $\omega [s^{-1}]$ | $\eta' [Pa.s]$ | $\eta'' [Pa.s]$ | Erro $\eta' [\pm Pa.s]$ | Erro $\eta'' [\pm Pa.s]$ |
|-------------------|----------------|-----------------|-------------------------|--------------------------|
| 0.015 | 21100.00 | 7130.00 | 707.10 | 212.13 |
| 0.02 | 19600.00 | 7210.00 | 707.12 | 212.14 |
| 0.04 | 16000.00 | 7210.00 | 424.26 | 127.28 |
| 0.05 | 14500.00 | 6965.00 | 141.42 | 21.21 |
| 0.16 | 8270.00 | 5560.00 | 127.28 | 113.14 |
| 0.20 | 7350.00 | 5270.00 | 127.28 | 127.28 |
| 0.32 | 5745.00 | 4670.00 | 134.35 | 127.28 |
| 0.50 | 4400.00 | 4035.00 | 98.99 | 120.20 |
| 0.79 | 3295.00 | 3400.00 | 77.78 | 98.99 |
| 1.00 | 2830.00 | 3090.00 | 70.71 | 84.85 |
| 1.58 | 2055.00 | 2505.00 | 49.48 | 77.78 |
| 2.00 | 1740.00 | 2240.00 | 42.43 | 70.71 |
| 2.51 | 1465.00 | 1990.00 | 35.35 | 56.57 |
| 3.16 | 1230.00 | 1755.00 | 28.28 | 49.50 |
| 4.00 | 1030.00 | 1540.00 | 28.28 | 42.42 |
| 5.01 | 859.50 | 1350.00 | 20.51 | 42.43 |
| 6.31 | 713.50 | 1175.00 | 16.26 | 35.35 |
| 7.94 | 591.50 | 1017.50 | 13.43 | 31.82 |
| 10.00 | 490.50 | 877.00 | 12.02 | 25.45 |
| 12.60 | 404.50 | 754.00 | 9.19 | 22.63 |
| 15.80 | 334.00 | 645.50 | 7.07 | 19.09 |
| 20.00 | 276.00 | 551.00 | 5.66 | 16.97 |
| 25.10 | 227.50 | 469.00 | 4.95 | 14.14 |
| 31.60 | 188.50 | 398.00 | 3.53 | 12.73 |
| 39.80 | 156.50 | 337.50 | 3.53 | 12.02 |
| 50.10 | 130.00 | 285.50 | 2.83 | 10.61 |
| 63.10 | 108.50 | 240.00 | 2.12 | 9.90 |
| 79.40 | 90.65 | 202.00 | 1.34 | 9.90 |
| 100.00 | 77.10 | 170.50 | 2.54 | 9.20 |



(a) Coeficiente Viscoso η'



(b) Coeficiente Elástico η''

Figura 6.24: Ajuste por frações continuadas dos módulos viscoelásticos η' e η'' . Em (a), na linha pontilhada, tem-se o ajuste dos dados experimentais (quadrados abertos) do módulo viscoso η' . Em (b), na linha pontilhada, tem-se o ajuste dos dados experimentais (quadrados abertos) do módulo elástico η'' . Dados experimentais obtidos de uma suspensão de PAMA a fração volumétrica $\phi = 10000 \text{ ppm}$ a 20°C .

6.3 Escoamento Extensional Oscilatório

Como abordado já no caso do escoamento oscilatório simples, nesta seção é apresentado os resultados para o escoamento extensional oscilatório onde se verá o comportamento da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$ tanto no domínio do tempo adimensional \tilde{t} quanto no domínio da frequência adimensional $\tilde{\omega}$, para os dois já conhecidos regimes: 1) Elástico em que assume-se que $De \ll 1$ o que implica $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$ e 2) Anisotrópico onde $De \approx 1$ e assim tem-se que $f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$. Será apresentado também a variação da função $R^2 = tr(\tilde{\mathbf{B}})$ em função do parâmetro De .

Considere, inicialmente, o campo dimensional de velocidade do escoamento extensional oscilatório dado pela expressão [8]:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \dot{\epsilon}_0 \cos(\omega t) \left(x_1, -\frac{1}{2}x_2, -\frac{1}{2}x_3 \right). \quad (6.44)$$

Aqui defini-se $\dot{\epsilon}(t) = \dot{\epsilon}_0 \cos(\omega t)$, medida em s^{-1} , como sendo a taxa de estiramento com amplitude $\dot{\epsilon}_0$ e ω como sendo a frequência de oscilação do escoamento.

A adimensionalização da equação (6.44) é feita de modo análogo ao caso do cisalhamento oscilatório descrito na seção (6.1), no qual usa-se novamente o parâmetro físico número de Deborah como sendo $De = \tau_p \dot{\epsilon}_0$. Continua-se usar $u_c = a/\tau_p$ como escala característica de velocidade. Desta maneira, tem-se o campo adimensional de velocidade dado pela expressão:

$$\tilde{\mathbf{u}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) = \frac{\mathbf{u}}{u_c} = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) \left(\tilde{x}_1, -\frac{1}{2}\tilde{x}_2, -\frac{1}{2}\tilde{x}_3 \right), \quad (6.45)$$

com

$$\tilde{\dot{\epsilon}}(\tilde{t}) = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}), \quad (6.46)$$

sendo a taxa de estiramento adimensional, $\tilde{\omega} = \tau_p \omega$ e $\tilde{t} = t/\tau_p$.

O interesse nessa etapa é examinar, no âmbito numérico, como se comporta a viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$, quando se varia o número de Deborah. Posteriormente investiga-se o comportamento dos módulos viscoelásticos, como no caso do cisalhamento oscilatório simples. Apresenta-se os coeficientes viscoelásticos da viscosidade extensional em fase e fora de fase com respeito à excitação dada pela equação (6.46).

Para obtenção destes resultados, conhecendo-se o campo de velocidade adimensional dada pela equação (6.45), o ponto de partida é sempre resolver o sistema de EDO's dado

pela equação de evolução temporal do tensor conformação \mathbf{B} , dada por:

$$\frac{d\tilde{\mathbf{B}}}{d\tilde{t}} = \tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}} \cdot (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2f(R)}{\sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}} \left(\tilde{\mathbf{B}} - \frac{1}{3}\mathbf{I} \right). \quad (6.47)$$

Após algumas manipulações algébricas, tem-se o sistema geral (caso $f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$) a ser resolvido para obtenção das componentes de interesse do tensor \mathbf{B} . O sistema é dado por:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -De\tilde{B}_{22} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{22} - \frac{1}{3} \right); \\ \frac{d\tilde{B}_{33}}{d\tilde{t}} = -De\tilde{B}_{33} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{33} - \frac{1}{3} \right); \\ \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = 2De\tilde{B}_{11} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{11} - \frac{1}{3} \right). \end{cases} \quad (6.48)$$

No sistema (6.48) é possível verificar que $\tilde{B}_{22}(\tilde{t}) = \tilde{B}_{33}(\tilde{t})$, e conseqüentemente tem-se $\tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t}) = \tilde{\sigma}_{33}(\tilde{t})$ entre as componentes do tensor de tensões $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$. Esta última igualdade se deve ao fato de a equação do tensor adimensional $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ é dada por:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\tilde{\mu}_s(\phi)\tilde{\mathbf{D}} + \frac{9\phi}{2} f(R)\tilde{\mathbf{B}}. \quad (6.49)$$

Neste estágio a viscosidade adimensional $\tilde{\mu}_s$ utilizada segue o modelo equivalente linear de Einstein [24], como na seção anterior, $\tilde{\mu}_s(\phi) = 1 + c\phi$ e $c = 1.53 \times 10^5$.

Tem-se ainda:

$$\tilde{\mathbf{D}} = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T. \quad (6.50)$$

6.3.1 Solução Assintótica para $De \ll 1$.

Nesta seção apresenta-se o resultado do estudo deste escoamento extensional oscilatório no caso do limite assintótico (regime elástico) onde assumi-se que $De \ll 1$, e deste modo pode-se considerar $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$ como foi feito no caso permanente ($\tilde{\omega} = 0$) do escoamento extensional da seção (5.5). Aplicando estas condições ao sistema (6.48), o

mesmo se reduz a:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = 2De\tilde{B}_{11} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\left(\tilde{B}_{11} - \frac{1}{3}\right); \\ \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -De\tilde{B}_{22} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\left(\tilde{B}_{22} - \frac{1}{3}\right). \end{cases} \quad (6.51)$$

Resolvendo-se o sistema (6.51), obtem-se como solução para as funções $\tilde{B}_{11}(\tilde{t})$ e $\tilde{B}_{22}(\tilde{t})$, as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{11}(\tilde{t}) = & \frac{1}{3} \exp\left(\frac{2De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) + \\ & + \frac{2}{3} \exp\left(\frac{2De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) \int_0^{\tilde{t}} \exp\left(\frac{-2De \sin(\tilde{\omega}x) - 2\tilde{\omega}x}{\tilde{\omega}}\right) dx, \end{aligned} \quad (6.52)$$

e

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{22}(\tilde{t}) = & \frac{1}{3} \exp\left(\frac{-De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) + \\ & + \frac{2}{3} \exp\left(\frac{-De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) \int_0^{\tilde{t}} \exp\left(\frac{De \sin(\tilde{\omega}x) + 2\tilde{\omega}x}{\tilde{\omega}}\right) dx. \end{aligned} \quad (6.53)$$

Para a obtenção das equações (6.52) e (6.53) acima já se considerou a condição inicial, $\tilde{B}_{11}(0) = \tilde{B}_{22}(0) = 1/3$, o que pode ser verificado de imediato.

Conhecendo-se as soluções para $\tilde{B}_{11}(\tilde{t})$ e $\tilde{B}_{22}(\tilde{t})$ o próximo passo é substituir as equações (6.52) e (6.53) do tensor conformação na equação (6.49) para se ter a reologia ou no caso as componentes $\tilde{\sigma}_{11}(\tilde{t})$ e $\tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t})$ do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}(\tilde{t})$. Fazendo isto, resulta:

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{11}(\tilde{t}) = & 2De\tilde{\mu}_s(\phi) \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{3}{2}\phi \exp\left(\frac{2De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) + \\ & + 3\phi \exp\left(\frac{2De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) \int_0^{\tilde{t}} \exp\left(\frac{-2De \sin(\tilde{\omega}x) - 2\tilde{\omega}x}{\tilde{\omega}}\right) dx, \end{aligned} \quad (6.54)$$

e

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t}) = & -De\tilde{\mu}_s(\phi) \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{3}{2}\phi \exp\left(\frac{-De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) + \\ & + 3\phi \exp\left(\frac{-De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) \int_0^{\tilde{t}} \exp\left(\frac{De \sin(\tilde{\omega}x) + 2\tilde{\omega}x}{\tilde{\omega}}\right) dx. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Desde que $\tilde{\sigma}_{22} = \tilde{\sigma}_{33}$, ao substituir as equações (6.54) e (6.55) na equação da viscosidade extensional adimensional dada por,

$$\tilde{\mu}_e(\tilde{t}) = \frac{2\tilde{\sigma}_{11}(\tilde{t}) - \tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t}) - \tilde{\sigma}_{33}(\tilde{t})}{6} = \frac{1}{3} \left[\tilde{\sigma}_{11}(\tilde{t}) - \tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t}) \right], \quad (6.56)$$

obtem-se, finalmente, a expressão da viscosidade no regime de pequenas deformações para o escoamento extensional oscilatório, dada por:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_e(\tilde{t}) = & De\tilde{\mu}_s(\phi) \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) + \frac{1}{2}\phi \exp\left(\frac{2De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) - \frac{1}{2}\phi \exp\left(\frac{-De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) + \\ & + \phi \exp\left(\frac{2De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) \int_0^{\tilde{t}} \exp\left(\frac{-2De \sin(\tilde{\omega}x) - 2\tilde{\omega}x}{\tilde{\omega}}\right) dx + \\ & - \phi \exp\left(\frac{-De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t}) - 2\tilde{\omega}\tilde{t}}{\tilde{\omega}}\right) \int_0^{\tilde{t}} \exp\left(\frac{De \sin(\tilde{\omega}x) + 2\tilde{\omega}x}{\tilde{\omega}}\right) dx. \end{aligned} \quad (6.57)$$

Vale observar a partir da equação (6.56) que a viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$ pode ser expressa em termos da primeira diferença de tensões normais adimensional, $\tilde{N}_1(\tilde{t}) = \tilde{\sigma}_{11}(\tilde{t}) - \tilde{\sigma}_{22}(\tilde{t})$. Portanto para este escoamento no regime $De \ll 1$, pode-se escrever:

$$\tilde{N}_1(\tilde{t}) = 3\tilde{\mu}_e(\tilde{t}). \quad (6.58)$$

Na figura (6.25) mostra-se uma comparação entre as soluções assintóticas (caso $De \ll 1$) e numéricas (caso geral $f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$), para o escoamento aqui examinado. As soluções assintóticas foram obtidas das equações (6.54), (6.55) e (6.57) por meio de integração numérica via regra dos trapézios, visto que as integrais que aparecem nestas equações não se resolvem de forma analítica como nos escoamentos estudados anteriormente. Para o caso em que $f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$ resolveu-se a primeira e terceira equações do sistema (6.48) via integração numérica pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem e em seguida utilizou-se as equações (6.49) e (6.56) para a caracterização reológica. Todos os gráficos apresentados na figura (6.25) foram obtidos para $De = 0.1$, $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

A figura (6.25) indica que existe um comportamento harmônico na série temporal das tensões $\tilde{\sigma}_{11}$ e $\tilde{\sigma}_{22}$ e, conseqüentemente, na viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$, o que caracteriza um regime linear do sistema. Isto implica que neste limite do escoamento, $De = 0.1 \ll 1$, as macromoléculas do fluido estão pouco deformadas e/ou estiradas pelo escoamento, isto é, regime de pequenas deformações. Percebe-se ainda que as funções oscilam em uma amplitude relativamente pequena, quando comparada com os demais casos da próxima seção. No gráfico (d) da figura (6.25) é visto que a amplitude máxima de oscilação da função $\tilde{\mu}_e(\tilde{t})$, no caso $\tilde{\omega} = 1$, coincide com o valor constante de $\tilde{\mu}_e(\tilde{t})$ no caso permanente em que $\tilde{\omega} = 0$.

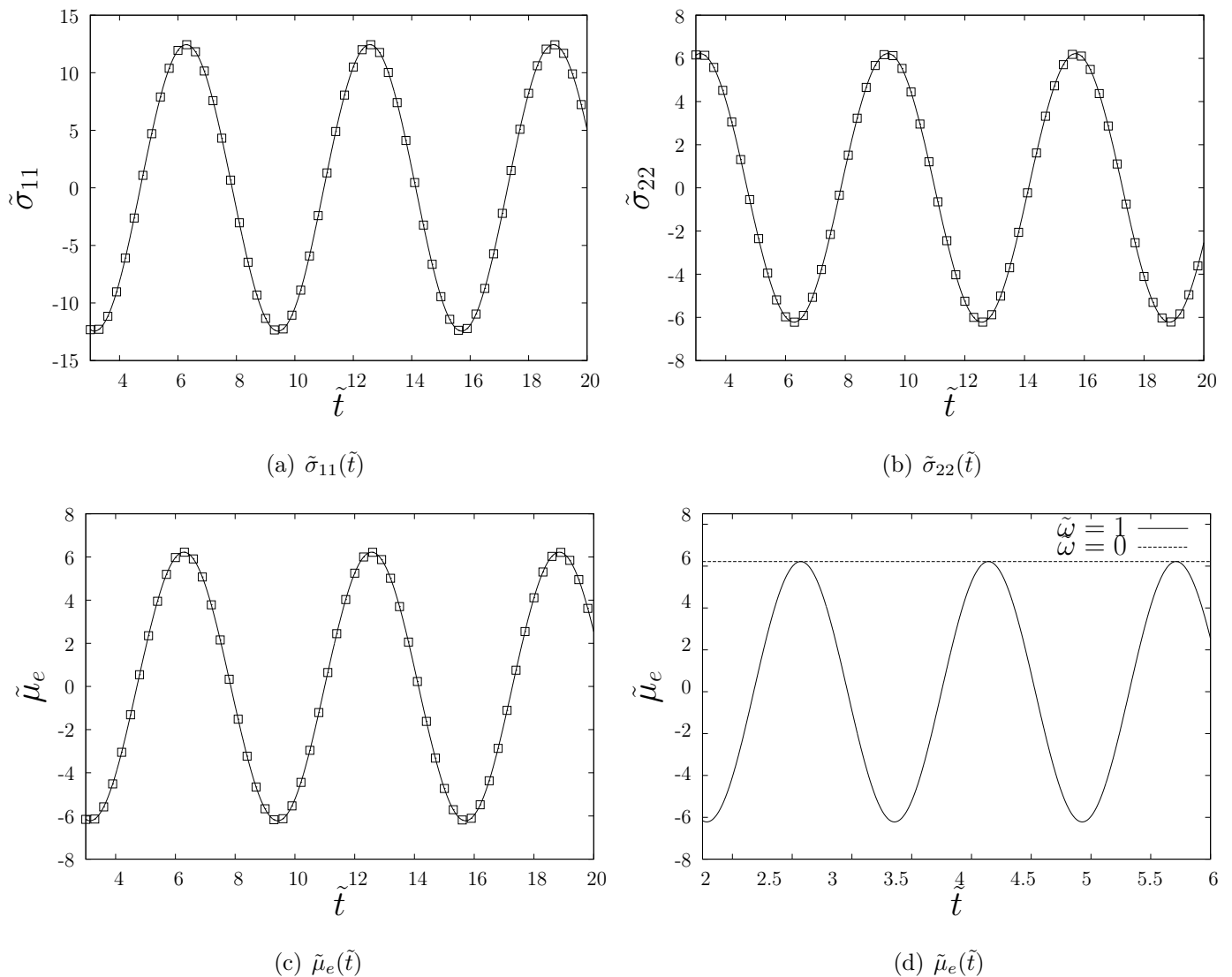
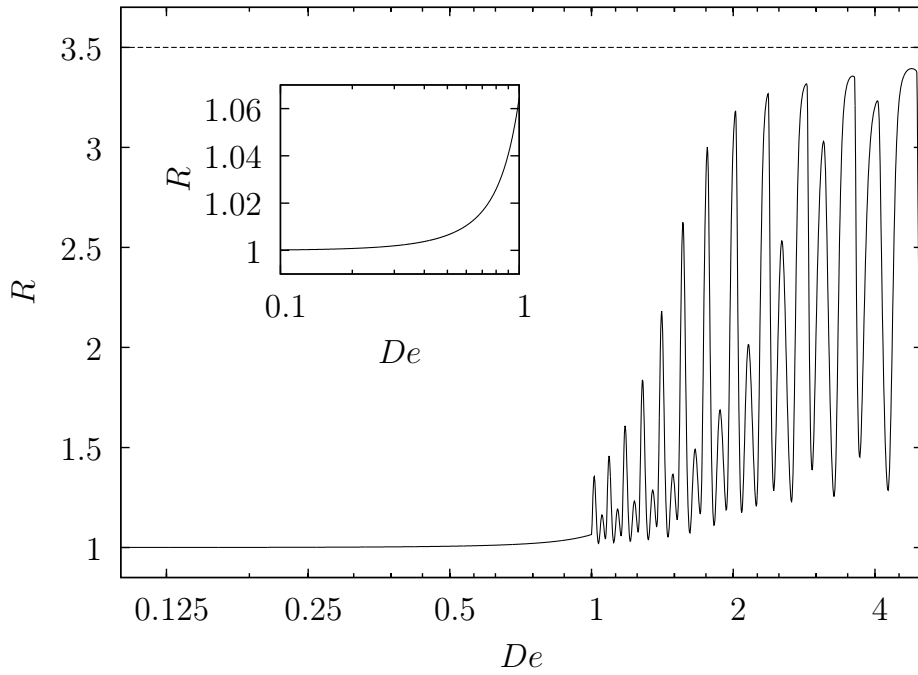


Figura 6.25: Soluções no limite assintótico (linha contínua) e numérica (quadrados abertos) das funções: Em (a) $\tilde{\sigma}_{11}$, (b) $\tilde{\sigma}_{22}$ e (c)=(d) $\tilde{\mu}_e$, do escoamento extensional oscilatório. As soluções assintóticas nas linhas contínuas em (a), (b) e (c) foram obtidas por integração numérica das equações (6.54), (6.55) e (6.57), respectivamente. Os quadrados abertos em (a), (b) e (c) denotam as soluções numéricas da primeira e terceira equação do sistema (6.48) e posterior uso das equações (6.49) e (6.56). Na figura (d) apresenta-se, também, o caso permanente em que $\tilde{\omega} = 0$, para a viscosidade extensional adimensional. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $L = 60$, $De = 0.1$ e $\tilde{\omega} = 1$.

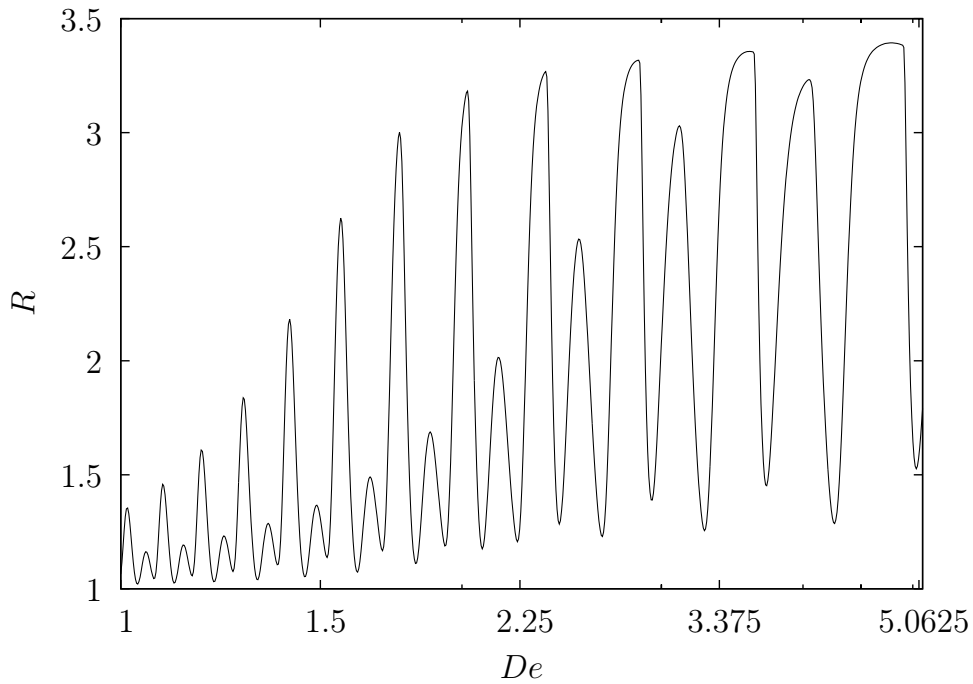
Na figura (6.26) tem-se a solução numérica da variação de $R = \sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})} = \sqrt{\tilde{B}_{11} + 2\tilde{B}_{22}}$, neste caso, em função do parâmetro De . Agora utiliza-se os parâmetros como sendo $L = 3.5$, $\phi = 200 \text{ ppm}$, como na figura (5.10) e ainda $\tilde{\omega} = 1$. Vê-se na figura (6.26)(a) o comportamento de R para Deborah variando de 0.1 até 5. Para Deborah menor que a unidade não existe um comportamento oscilatório na resposta de R . Isto indica, dentre outros fatores, que até este ponto as macromoléculas sofrem pequena deformação pelo escoamento imposto e não responde de forma não-newtoniana à excitação extensional oscilatória, o que fica evidente quando se vê o comportamento da variação de R no encarte da figura (6.26)(a), com $1 \leq R < 1.08$, isto é, $R \approx 1$ quando $0.1 \leq De \leq 1$.

Na figura (6.26)(b) percebe-se, no entanto, um comportamento oscilatório de R para $1 \leq De \leq 5$ e que sua amplitude de oscilação aumenta sobre maneira, mas sempre pode-se observar que $R < 3.5 = L$, desde que $L = 3.5$ corresponde ao limite máximo de extensibilidade das macromoléculas do fluido neste caso. Ocorreu ainda nesta simulação que, para $De > 5$, o valor de oscilação de R superava o valor de $L = 3.5$, indicando assim uma degradação na microestrutura das macromoléculas. E por este motivo a simulação numérica se limitou a faixa de variação do parâmetro De utilizada na figura (6.26).

Há de se notar, finalmente, que no caso extensional oscilatório para $De \approx 4$ o valor de oscilação de R atingiu as proximidades de $L = 3.5$. No caso extensional permanente, que gerou a figura (5.10), vê-se que esse comportamento também ocorreu, porém com uma pequena e importante ressalva. Na figura (5.10) tem-se que o valor de R está mais próximo de $L = 3.5$, nas vizinhanças de $De = 4$ do que na figura (6.26). Isto indica que no caso extensional permanente o escoamento produz um estiramento maior nas macromoléculas do fluido, para uma mesma faixa de De , quando comparado ao caso equivalente do escoamento extensional oscilatório. O que explica este comportamento é a natureza oscilatória do escoamento aqui apresentado já que enquanto num escoamento extensional permanente a macromolécula é estirada continuamente, num escoamento extensional oscilatório a mesma estira e relaxa ao passar do tempo. Isto significa que a macromolécula pode degradar para De notadamente menores em escoamentos extensionais permanentes.



(a) Variação de R para $0.1 \leq De \leq 5$



(b) Variação de R para $1 \leq De \leq 5$

Figura 6.26: Variação do comprimento de $R = \sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}$ em função do parâmetro De para o escoamento extensional oscilatório. No gráfico (a) tem-se na linha pontilhada o caso constante $R = 3.5$ e no encarte nota-se apenas uma pequena variação de R para $0.1 \leq De \leq 1$. Em (b) tem-se a variação de R para $1 \leq De \leq 5$. Parâmetros: $L = 3.5$, $\phi = 200 \text{ ppm}$ e $\tilde{\omega} = 1$.

6.3.2 Solução Numérica para $\tilde{\mu}_e$ no caso $De \geq 1$: Diagramas de Fase e Espectros de Potência.

Para finalizar a análise do escoamento extensional oscilatório, apresenta-se nesta seção o estudo do comportamento da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e(\tilde{t})$ em função do tempo adimensional \tilde{t} e da frequência $\tilde{\omega}$, para diferentes valores do parâmetro De .

Inicia-se na figura (6.27) com o comportamento da viscosidade extensional adimensional para quatro valores do número de Deborah.

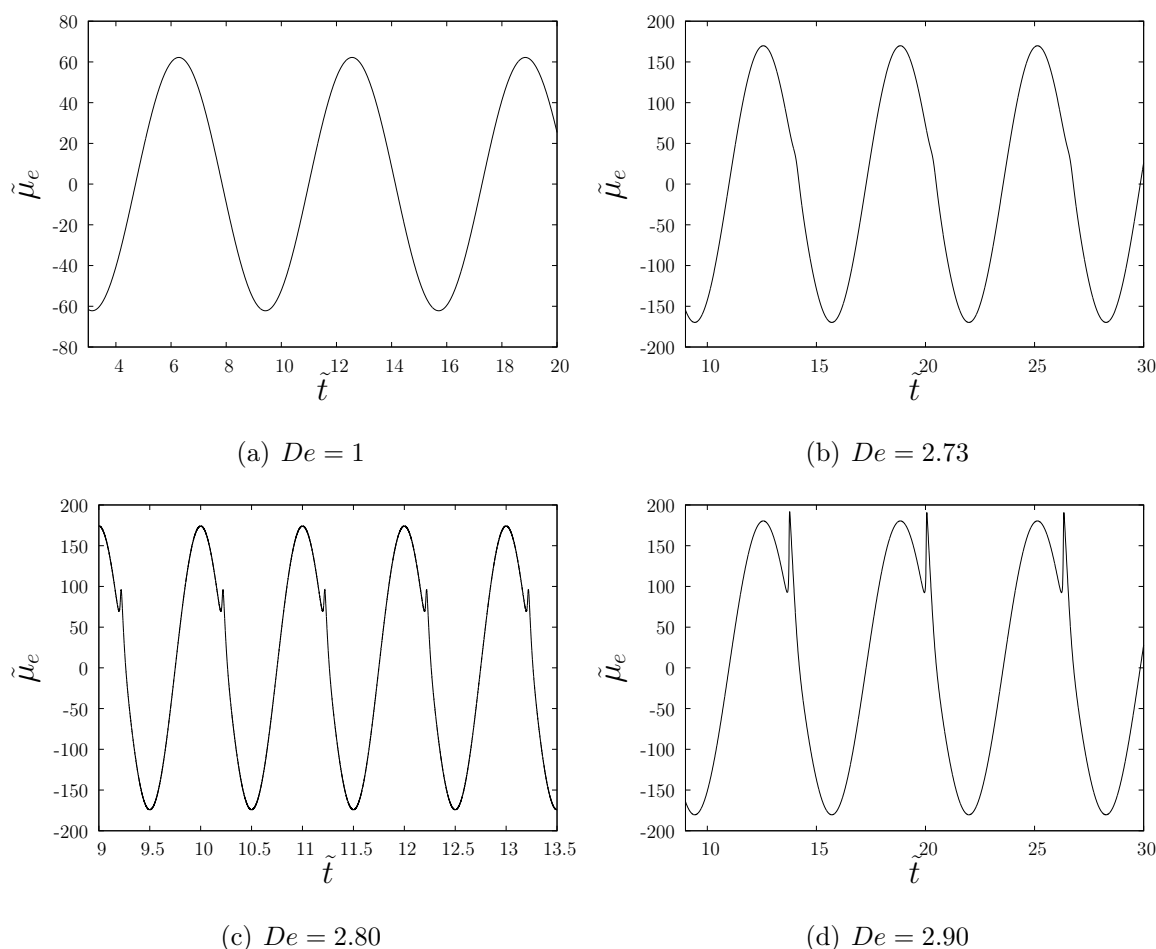


Figura 6.27: Solução numérica para o cálculo da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$ para quatro valores do parâmetro De . Em (a) $De = 1$, (b) $De = 2.73$, (c) $De = 2.80$ e (d) $De = 2.90$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$.

Inicialmente é visto na figura (6.27)(a) que apesar da amplitude de oscilação ser bem maior que no caso em que $De = 0.1$, da seção (6.3.1), a série temporal da viscosidade extensional apresenta um comportamento harmônico simples. Esta resposta pode ser também

ilustrada pelo diagrama de fase a seguir. Ao comparar-se com o caso do escoamento extensional permanente da seção (5.5), figura (5.7), nota-se que aqui o valor máximo de oscilação é bem inferior ao valor lá antigido, por exemplo para $De = 0.65$. Infere-se que isso ocorre devido ao fato de que, no escoamento extensional oscilatório, devido a esta deformação oscilatória, as macromoléculas sofrem constantemente um estiramento e um relaxamento o que acarreta a uma variação da magnitude de $\tilde{\mu}_e(\tilde{t})$ não tão significativa quando comparada com o caso puramente extensional da figura (5.7) no qual a macromolécula sofre um estiramento contínuo apenas.

Ainda na figura (6.27), nos gráficos (b) e (c), percebe-se uma leve mudança (deformação) na forma da curva que descreve o comportamento da função $\tilde{\mu}_e$, isto caracteriza o surgimento de uma resposta não linear no nosso sistema onde tem-se o surgimento de outros harmônicos ou graus de liberdade vibracionais na resposta de oscilação do fluido, como se verá a seguir. No gráfico (d) da figura (6.27) isto se torna ainda mais evidente. Ademais, nota-se que o valor da amplitude máxima de oscilação nos gráficos (b), (c) e (d) ficam mais que o dobro quando comparados com o do gráfico (a).

Na figura (6.28) vê-se os gráficos dos diagramas de fase da viscosidade extensional adimensional, i.e., os gráficos de $d\tilde{\mu}_e/d\tilde{t}$ por $\tilde{\mu}_e$, para os mesmos quatro valores do número de Deborah apresentados na figura (6.27) e o mesmo conjunto dos parâmetros, $L = 60$, $\tilde{\omega} = 1$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$. Na¹⁰ figura (6.28)(a) tem-se o diagrama de fase no caso $De = 1$, onde nota-se um círculo perfeito, o que caracteriza um regime linear do nosso sistema. Isto é interessante já que para $De \approx 1$, no caso extensional permanente da seção (5.5.3), se vê grandes variações de $\tilde{\mu}_e$ que surgiram conseqüentemente de grandes amplitudes de estiramentos das macromoléculas do fluido, o que por sua vez, como visto até agora, provoca o aparecimento de efeitos não lineares. Tudo isso reforça a tese de que no escoamento extensional oscilatório as macromoléculas do fluido são poucos estiradas mesmo para $De \approx 1$.

Nos gráficos (b), (c) e (d) da figura (6.28) percebe-se que a medida que se aumenta o valor do número de Deborah o sistema sai, enfim, do regime linear. Pode-se notar que o formato do diagrama de fase sai de um círculo perfeito (regime linear em $De = 1$) para um formato bem mais complexo, o que caracteriza um regime fortemente não linear. Tem-

¹⁰Achamos desnecessário apresentar o retrato de fase no caso em que $De = 0.1 \ll 1$ visto que para $De = 1$ o sistema ainda é linear.

se desta forma que, para $De = 2.73$; 2.80 e 2.90, o escoamento provoca uma deformação nas macromoléculas do fluido de modo a ocasionar o aparecimento de outros harmônicos de oscilação de grande amplitude, quebrando desta forma a linearidade do sistema e produzindo uma resposta reológica não-linear. Novamente aqui, este fato, corrobora com a análise feita para a figura (6.26)(b).

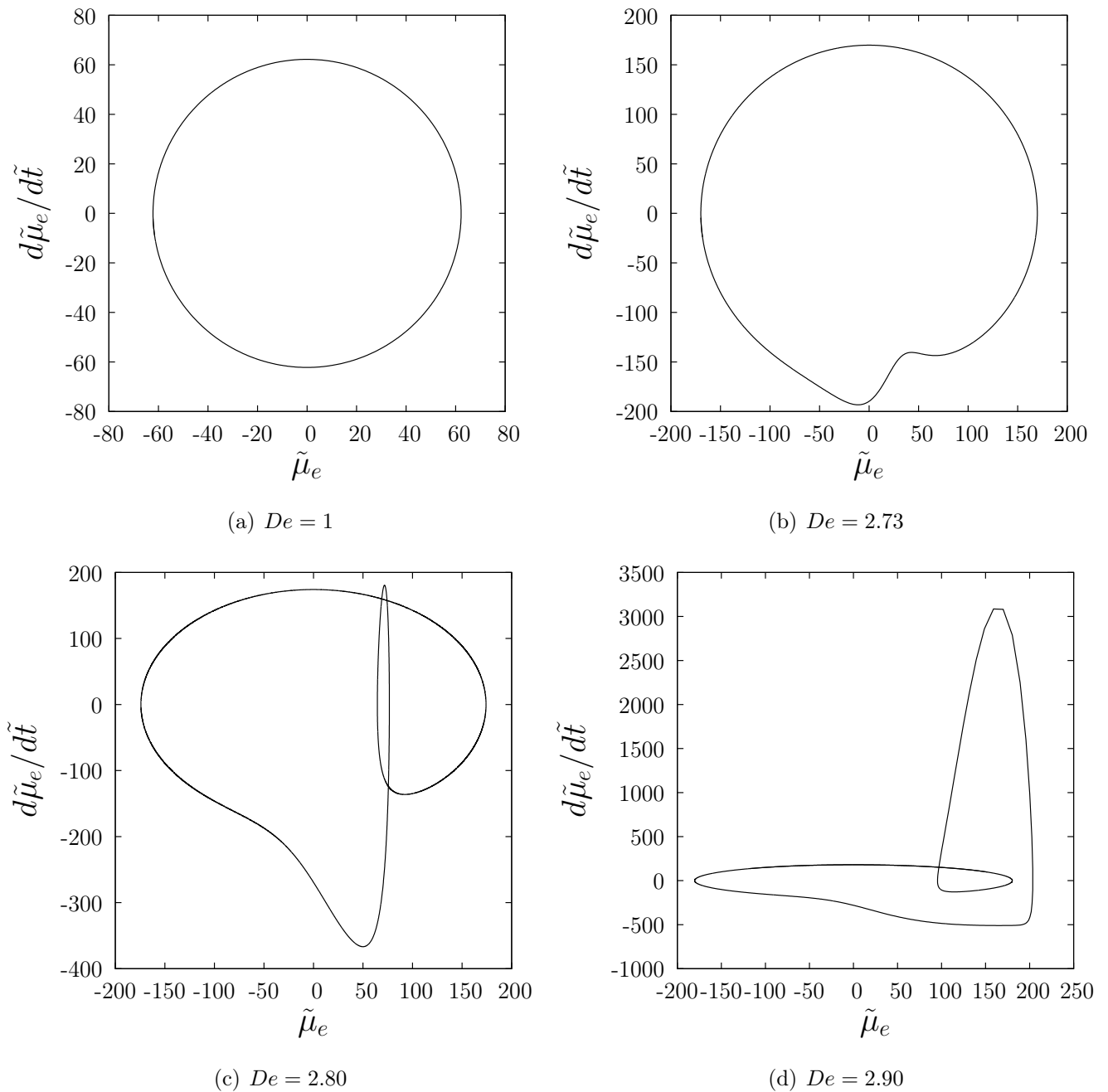


Figura 6.28: Diagramas de fase referente a série temporal da viscosidade extensional adimensional, $\tilde{\mu}_e$, para quatro valores do parâmetro De . Em (a) $De = 1$, (b) $De = 2.73$, (c) $De = 2.80$ e (d) $De = 2.90$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$.

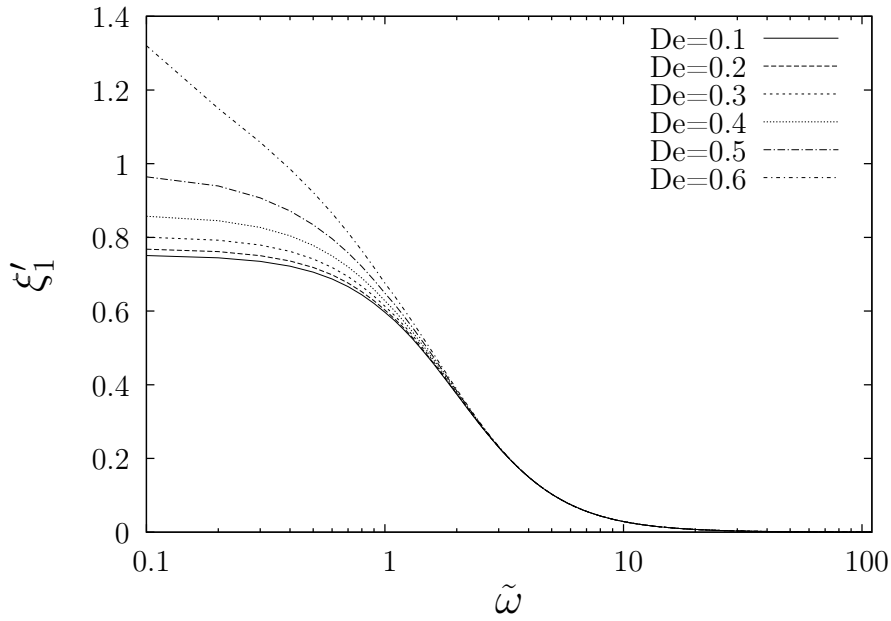
Analogamente, como feito para o cisalhamento oscilatório simples na seção (6.1.4), pode-se escrever a viscosidade adimensional $\tilde{\mu}_e$ como sendo uma soma de senos e cossenos. Lembre-se que no início desta seção a excitação do fluido é dada pela taxa de estiramento adimensional dada por $\tilde{\epsilon} = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$, deste modo pode-se escrever $\tilde{\mu}_e$ de uma maneira geral como sendo:

$$\tilde{\mu}_e(\tilde{t}, \tilde{\omega}, De) = \sum_{n=1}^M \left[\xi'_n(n\tilde{\omega}, De) \cos(n\tilde{\omega}\tilde{t}) + \xi''_n(n\tilde{\omega}, De) \sin(n\tilde{\omega}\tilde{t}) \right], \quad (6.59)$$

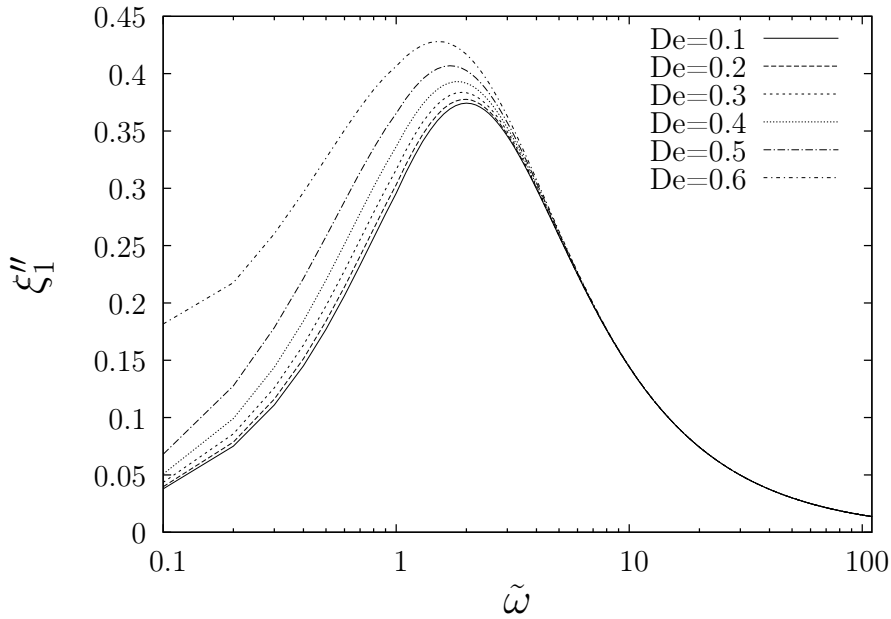
em que $\xi'_n(n\tilde{\omega}, De)$ e $\xi''_n(n\tilde{\omega}, De)$ são coeficientes em fase e fora de fase com a taxa de estiramento, respectivamente. Como na seção (6.1.4) aqui também $M \rightarrow +\infty$.

Na figura (6.29) tem-se a solução numérica para $\xi'_1(\tilde{\omega})$ e $\xi''_1(\tilde{\omega})$, obtida pela aplicação da DFT a série temporal da equação (6.57), para cada $\tilde{\omega}$ no intervalo $[10^{-1}, 10^2]$. Nota-se nesta figura (6.29) uma certa semelhança com a figura (6.10), obtida neste último caso para o escoamento por cisalhamento oscilatório simples. No gráfico (a) da figura (6.29) tem-se no entanto para $De = 0.6$ um comportamento similar com o caso $De = 2.25$ do gráfico (a) da figura (6.10). O que indica que no escoamento extensional oscilatório tem-se uma deformação maior nas macromoléculas do fluido do que no cisalhamento simples oscilatório. A mesma análise se aplica aos dois gráficos (b) das figuras (6.29) e (6.10).

Na figura (6.29)(b) tem-se o coeficiente fora de fase ξ''_1 , em função de $\tilde{\omega}$ para diferentes De . Nota-se um desvio na simetria do gráfico devido ao surgimento dos efeitos não lineares mais intensos a medida que se aumenta o número de De . Quando se compara os gráficos (a) e (b) da figura (6.29) nota-se que, para altas e baixas frequências, a preponderância dos efeitos do coeficiente em fase com a taxa de estiramento.



(a) Primeiro coeficiente em fase com taxa de estiramento, ξ_1' .

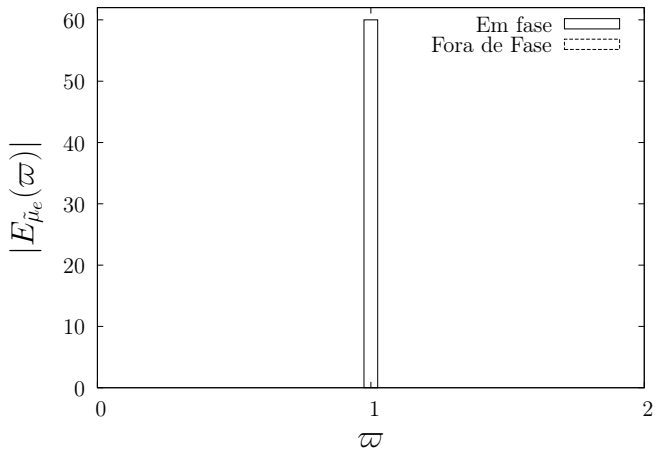


(b) Primeiro coeficiente fora de fase com a taxa de estiramento, ξ_1'' .

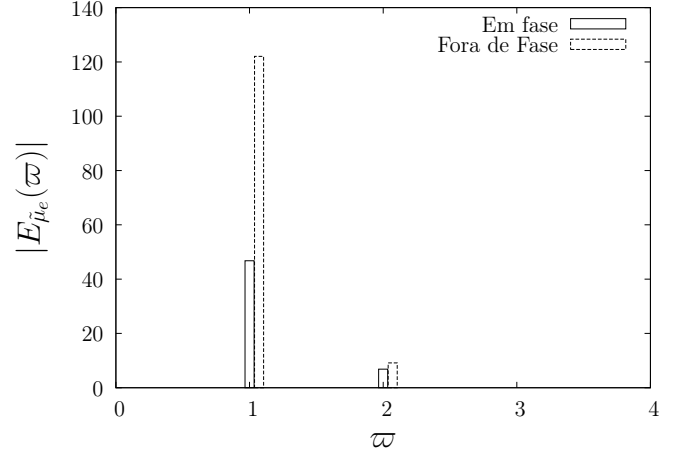
Figura 6.29: Primeiros coeficientes em fase e fora de fase com a taxa de estiramento da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$. Em (a) tem-se o coeficiente $\xi_1'(\tilde{\omega})$ em fase com excitação $\tilde{\epsilon} = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$. Em (b) tem-se o coeficiente fora de fase $\xi_1''(\tilde{\omega})$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

A figura (6.30) apresenta, por fim, os espectros de potência $E_{\tilde{\mu}_e}(\varpi)$ da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$ para vários valores do parâmetro De . Novamente fixa-se $\tilde{\omega} = 1$ e para cada valor de De simulado aplica-se a DFT a série temporal da equação geral para $\tilde{\mu}_e$, dada pela equação (6.57), e em seguida extrai-se os coeficientes em fase $\xi'_n(\tilde{\omega} = 1)$ e fora de fase $\xi''_n(\tilde{\omega} = 1)$ com a excitação $\tilde{\epsilon}(\tilde{t}) = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$ para $n = 1, 2, \dots$

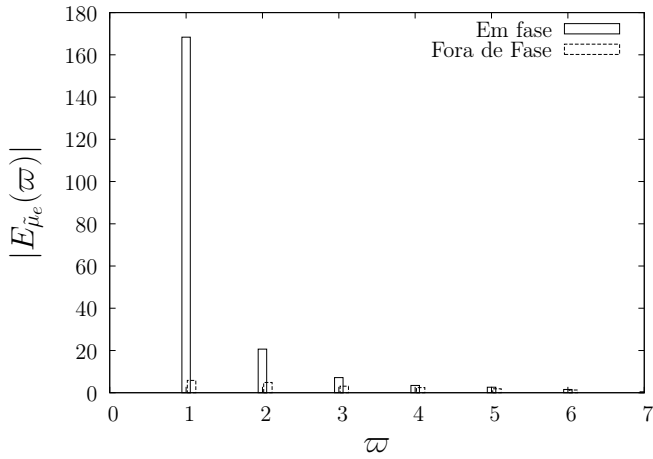
No gráfico (a) da figura (6.30) (caso $De = 1$) observa-se apenas a resposta na frequência fundamental de excitação $\tilde{\omega} = 1$, indicando, como no gráfico (a) da figura (6.28), que se trata de forma equivalente a um regime de viscoelasticidade linear para a resposta temporal de $\tilde{\mu}_e$. Aqui obteve-se $|\xi'_1| \approx 60$ e $\xi''_1 = 0$. A medida que se aumenta o valor de De nos gráficos (b), (c) e (d) da figura (6.30) nota-se que o valor absoluto das amplitudes dos espectros de potência aumentam quando analisados na frequência fundamental $\tilde{\omega} = 1$ nos diferentes números de De . Ademais observa-se na figura (6.30)(d) o surgimento de $M = 9$ auto-funções ou modos oscilatórios em frequências ϖ múltiplas da frequência fundamental de excitação, $\tilde{\omega} = 1$, mesmo que em valor absoluto menor que na frequência fundamental, o que já indica um comportamento não linear na resposta temporal de $\tilde{\mu}_e$, corroborando com o que foi apresentado na figura (6.28).



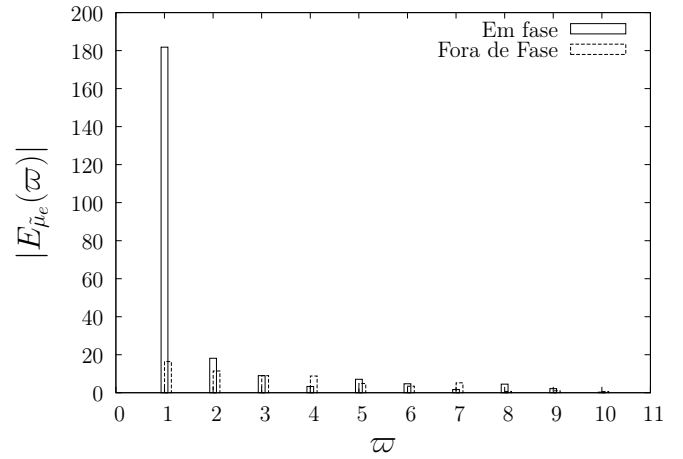
(a) $De = 1$



(b) $De = 2.73$



(c) $De = 2.80$



(d) $De = 2.90$

Figura 6.30: Módulo dos espectros de potência em fase e fora de fase da viscosidade extensiva adimensional $\tilde{\mu}_e$ para $\tilde{\omega} = 1$ fixo e diferentes valores do número de Deborah De . Em (a) $De = 1$, (b) $De = 2.73$, (c) $De = 2.80$ e (d) $De = 2.90$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$ e $L = 60$.

6.4 Resposta do fluido a um escoamento cisalhante oscilatório apenas com taxa de rotação

No início desta seção propõe-se o seguinte questionamento. Como seria a resposta do fluido quando se despreza os efeitos de deformação das macromoléculas ?

Como sabe-se, $\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{D}} + \tilde{\mathbf{W}}$, em que $\tilde{\mathbf{D}}$ é o tensor simétrico taxa de deformação e $\tilde{\mathbf{W}}$ é o tensor anti-simétrico taxa de rotação. O que pretende-se analisar é se com taxa de rotação apenas, provenientes de $\tilde{\mathbf{W}}$, é capaz de originar efeitos não-newtoninos das macromoléculas.

Para isso assumi-se um cisalhamento de pura rotação em que $\tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{0}$ e portanto $\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{W}}$ é substituído na equação (4.35). Neste ponto de nosso trabalho é proposto não mais a derivada Oldroyd alta na equação (4.24) e sim a derivada material co-rotacional de Jauman conforme obtida no apêndice (III) desta tese, dada pela seguinte expressão:

$$\frac{\mathcal{D}\mathbf{B}}{\mathcal{D}t} = \frac{D\mathbf{B}}{Dt} + \mathbf{B}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{B}, \quad (6.60)$$

em que $\mathbf{W} = (\nabla\mathbf{u} - (\nabla\mathbf{u})^T)/2$.

Utiliza-se ainda as mesmas propostas de adimensionalizações que geraram as equações governantes (4.34) e (4.35). Portanto, substitui-se agora a equação (6.60) na equação (4.24) e considera-se também o modelo não-linear Dumbbell-Fene. Desta maneira, obtém-se uma nova equação adimensional de evolução temporal para o tensor conformação $\tilde{\mathbf{B}}$, dada por

$$\frac{d\tilde{\mathbf{B}}}{d\tilde{t}} = \tilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{B}} - \tilde{\mathbf{B}}\tilde{\mathbf{W}} - 2\frac{f(R)}{R}\left(\tilde{\mathbf{B}} - \frac{1}{3}\right), \quad (6.61)$$

em que ainda se tem $f(R) = L^2/(L^2 - R^2)$ e $R = \sqrt{tr(\tilde{\mathbf{B}})}$. Ressalta-se ainda que $\tilde{\mathbf{W}} = \mathbf{W}\tau$, onde τ é o tempo de relaxação da macromolécula. Ainda tem-se que a equação do tensor de tensões permanece inalterada¹¹, isto é,

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\tilde{\mu}_s(\phi)\tilde{\mathbf{D}} + \frac{9\phi}{2}f(R)\tilde{\mathbf{B}}. \quad (6.62)$$

Como o tensor \mathbf{W} está associado à rotação, o objetivo é determinar também a solução da equação (6.61) para o campo de velocidade do cisalhamento oscilatório. Deste modo,

¹¹Aqui resolveu-se trabalhar novamente com $\tilde{\mu}_s(\phi) = 1 + c\phi$ já que o foco principal é examinar a parte tensorial associada com a relaxação da macromolécula.

$\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}}$ e $\tilde{\mathbf{W}}$, serão dados por:

$$\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} 0 & De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \tilde{\mathbf{W}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & 0 \\ -De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.63)$$

Usando as equações (6.63) e (6.61), pode-se escrever o seguinte sistema (para o caso geral em que $f(R) \neq 1$ e $R \neq 1$) com as componentes de interesse do tensor \mathbf{B}

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{21} + \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{12} - 2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{11} - \frac{1}{3} \right), \\ \frac{d\tilde{B}_{12}}{d\tilde{t}} = \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{22} - \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{11} - 2\frac{f(R)}{R} \tilde{B}_{12}, \\ \frac{d\tilde{B}_{21}}{d\tilde{t}} = -\frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{11} + \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{22} - 2\frac{f(R)}{R} \tilde{B}_{21}, \\ \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -\frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{12} - \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{21} - 2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{22} - \frac{1}{3} \right), \\ \frac{d\tilde{B}_{33}}{d\tilde{t}} = -2\frac{f(R)}{R} \left(\tilde{B}_{33} - \frac{1}{3} \right). \end{array} \right. \quad (6.64)$$

Analisando o sistema (6.64) conclui-se que $\tilde{B}_{12} = \tilde{B}_{21}$.

6.4.1 Solução no regime assintótico $De \ll 1$

Usando agora a hipótese de pequenas deformações, isto é, o caso em que $De \ll 1$ (desse modo $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$), o sistema de EDO's que surgirá do sistema (6.64) será dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\tilde{B}_{11}}{d\tilde{t}} = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) \tilde{B}_{12} - 2\tilde{B}_{11} + \frac{2}{3}, \\ \frac{d\tilde{B}_{12}}{d\tilde{t}} = \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{22} - \frac{De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}{2} \tilde{B}_{11} - 2\tilde{B}_{12}, \\ \frac{d\tilde{B}_{22}}{d\tilde{t}} = -De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) \tilde{B}_{12} - 2\tilde{B}_{22} + \frac{2}{3}, \\ \frac{d\tilde{B}_{33}}{d\tilde{t}} = -2 \left(\tilde{B}_{33} - \frac{1}{3} \right). \end{array} \right. \quad (6.65)$$

Da última equação do sistema (6.65) obtém-se a solução $\tilde{B}_{33}(\tilde{t}) = 1/3$, para $\tilde{t} > 4$. É conveniente ainda escrever o sistema (6.65) na forma matricial abaixo:

$$\frac{d\mathbf{y}}{d\tilde{t}} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{y} + \mathbf{R}, \quad (6.66)$$

em que \mathbf{y} é o vetor coluna $\mathbf{y} = (\tilde{B}_{11} \ \tilde{B}_{22} \ \tilde{B}_{12})^T$ e as matrizes \mathbf{T} e \mathbf{R} são dadas por:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) \\ 0 & -2 & -De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) \\ -\frac{De}{2} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & \frac{De}{2} \cos(\tilde{\omega}\tilde{t}) & -2 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{R} = \begin{pmatrix} 2/3 \\ 2/3 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.67)$$

Neste ponto faz-se uma importante observação de que as equações diferenciais do sistema (6.65) são totalmente acopladas, não sendo possível sua resolução de maneira analítica direta como feito para o caso do cisalhamento oscilatório simples referente ao sistema (6.6)¹². Para se obter um desacoplamento das equações diferenciais do sistema em análise, utiliza-se o processo de transformação modal [50]. Este processo consiste em resolver o sistema de EDO's dado, propondo a seguinte mudança de variável:

$$\frac{d(\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{y})}{dt} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{R} + \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{y}, \quad (6.68)$$

em que \mathbf{M} é a chamada matriz modal, a qual é formada pelos autovetores da matriz \mathbf{T} . Em adição usa-se também que:

$$\mathbf{y} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{v} \iff \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{v}, \quad (6.69)$$

sendo $\mathbf{v}(\tilde{t}) = (v_1 \ v_2 \ v_3)^T$ um vetor auxiliar. Nota-se que $\mathbf{F} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{M}$ é uma matriz diagonal e definindo: $\mathbf{f} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{R}$, a equação (6.68) reduz-se a seguinte forma:

$$\frac{d\mathbf{v}}{d\tilde{t}} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{f}. \quad (6.70)$$

Ao se calcular as matrizes \mathbf{M} e \mathbf{M}^{-1} obtém-se:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & -i & i \\ 1 & i & -i \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{M}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ i/4 & -i/4 & 1/2 \\ -i/4 & i/4 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad (6.71)$$

¹²Para obter este sistema foi utilizado derivada Oldroyd alta, diferente do presente contexto de um escoamento imposto de pura rotação.

em que $i = \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária dos números complexos. Deste modo a equação vetorial (6.70) no espaço modal resulta em um novo sistema de equações diferenciais ordinárias desacopladas. Segue:

$$\begin{cases} \frac{dv_1}{d\tilde{t}} = \frac{2}{3} - 2v_1, \\ \frac{dv_2}{d\tilde{t}} = (-2 + i De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})) v_2, \\ \frac{dv_3}{d\tilde{t}} = (-2 - i De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})) v_3. \end{cases} \quad (6.72)$$

Resolvendo-se o sistema de equações (6.72) chega-se a seguinte solução: $v_1(\tilde{t}) = \frac{1}{3} + C_1 \exp(-2\tilde{t})$. E para as componentes $v_2(\tilde{t})$ e $v_3(\tilde{t})$ tem-se,

$$v_2(\tilde{t}) = C_2 \left[\cos\left(\frac{De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t})}{\tilde{\omega}}\right) + i \sin\left(\frac{De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t})}{\tilde{\omega}}\right) \right] \exp(-2\tilde{t}), \quad (6.73)$$

e

$$v_3(\tilde{t}) = C_3 \left[\cos\left(\frac{De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t})}{\tilde{\omega}}\right) - i \sin\left(\frac{De \sin(\tilde{\omega}\tilde{t})}{\tilde{\omega}}\right) \right] \exp(-2\tilde{t}), \quad (6.74)$$

em que C_1, C_2 e C_3 são constantes de integração que dependem da condição inicial imposta (PVI). Considerando um tempo adimensional $\tilde{t} = t/\tau > 4$, como analisado na seção (5.2), tem-se apenas que $v_1(\tilde{t}) = 1/3$ e $v_2(\tilde{t}) = v_3(\tilde{t}) = 0$. Finalmente, como $\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{v}$, então $\tilde{B}_{11}(\tilde{t}) = \tilde{B}_{22}(\tilde{t}) = 1/3$ e $\tilde{B}_{12}(\tilde{t}) = 0$, no regime elástico no qual assumi-se $De \ll 1$, e por conseguinte $f(R) \approx 1$ e $R \approx 1$.

Usando a equação (6.62), determina-se que a primeira diferença de tensões normais é nula, i.e, $\tilde{N}_1(\tilde{t}) = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{22} = 0$, ou seja, não se tem a presença de tensões normais no regime de pequenas deformações ($De \ll 1$) para o escoamento oscilatório de pura rotação, usando-se a derivada de Jaumann para evolução temporal do tensor conformação \mathbf{B} . O que pode ainda explicar este fato, fisicamente falando, é que neste tipo de escoamento tem-se que as macromoléculas que constituem o fluido apenas giram com a velocidade angular ou velocidade do escoamento de pura rotação imposto.

Em contraste, foi obtida uma expressão para \tilde{N}_1 (quando assumiu-se $\mathbf{D} \neq \mathbf{0}$ na seção (6.1)) onde pode ser visto na equação (6.17) que $\tilde{N}_1 \neq 0$, para o mesmo regime de pequenas deformações. Isto mostra que quando as macromoléculas são sujeitas a um escoamento de pura rotação ou se a taxa de rotação do escoamento é muito maior que a taxa de deformação

as macromoléculas podem ser consideradas sempre em regime de pequenas deformações e não produzem efeitos de anisotropia e não-lineares, exceto um aumento de dissipação na suspensão polimérica.

Para a tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}$ tem-se apenas a contribuição viscosa, dada por:

$$\tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}) = \underbrace{\tilde{\mu}_s(\phi) De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}_{\text{Puramente Viscosa}} + 0, \quad \text{para } De \ll 1, \quad (6.75)$$

que recai na definição de Newton (equação (2.1)) para viscosidade em sua forma adimensional. Pode-se dizer ainda que o fluido em questão se comporta como um fluido newtoniano equivalente com a viscosidade efetiva da suspensão, $\tilde{\mu}_s(\phi)$, dada segundo o modelo de Einstein.

É instrutivo notar que a equação (6.75) no regime de pequenas deformações ($De \ll 1$) não possui a parte da contribuição elástica proveniente das macromoléculas, pois da equação geral para $\tilde{\sigma}_{12}$ (eq. (6.62)), pode-se escrever:

$$\tilde{\sigma}_{12}(De, \tilde{t}) = \underbrace{\tilde{\mu}_s(\phi) De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})}_{\text{Puramente Viscosa}} + \underbrace{\frac{9\phi}{2} f(R) \tilde{B}_{12}(\tilde{t})}_{\text{Conformação}}, \quad \text{para todo } De. \quad (6.76)$$

6.4.2 Condição para efeitos não-Newtonianos por apenas rotação em $\tilde{\sigma}_{12}$ no cisalhamento simples oscilatório

Como se vê na equação (6.76), a série temporal $\tilde{\sigma}_{12}$ possui como resposta uma contribuição na parte newtoniana da suspensão polimérica e uma parte exclusiva da relaxação das macromoléculas incorporadas ao fluido base. Inicialmente assumi-se a função \tilde{g}_{12} (analogamente a seção (6.1.2)), que conforme a equação (6.75) permite escrever:

$$\tilde{g}_{12}(De) = 0, \quad \text{para } De \ll 1. \quad (6.77)$$

Na presente análise assume-se um tempo adimensional fixo, t^* , tal que $t^* > 4$. Como o interesse é inferir sobre variações na conformação das macromoléculas que deformam na resposta de $\tilde{\sigma}_{12}$ a medida que se aumenta De , para o tempo t^* fixo, defini-se $\tilde{\sigma}_{12}^M$ a partir das equações (6.76) e (6.77), do seguinte modo:

$$\tilde{\sigma}_{12}^M = \tilde{\sigma}_{12}^M(De) = \frac{\tilde{\sigma}_{12}(De, t^*) - \tilde{g}_{12}(De)}{\phi} = \frac{9}{2} f(R) \Big|_{t^*} \tilde{B}_{12}(t^*), \quad \text{para todo } De. \quad (6.78)$$

Portanto $\tilde{\sigma}_{12}^M$ representa uma função $\tilde{\sigma}_{12}$ das macromoléculas, avaliada em $t^* > 4$. Deve-se notar assim, a medida que varia-se o parâmetro De , a equação (6.78) nos fornece apenas a resposta da contribuição das macromoléculas para a função $\tilde{\sigma}_{12}$.

A figura (6.31) mostra uma comparação das funções dadas pelas equações (6.77) e (6.78), para $0 \leq De < 1$. A solução numérica da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ foi obtida via integração pelo método de Runge-Kutta do sistema (6.64). É possível ver que a diferença¹³ entre essas funções é sempre menor que 1% para $De \leq 0.35$. O encarte da figura (6.31) fornece mais detalhes da referida diferença. Depreende-se, então, que para $De \leq 0.35$ a deformação imposta nas macromoléculas por um cisalhamento simples oscilatório de pura rotação ainda não é suficiente para produzir efeitos significativos não-lineares ou não-Newtonianos (que são intrínsecos às macromoléculas).

¹³Aqui exige apenas a diferença e não a diferença relativa, como feito na seção (6.1.2), pois aqui $\tilde{g}_{12} = 0$.

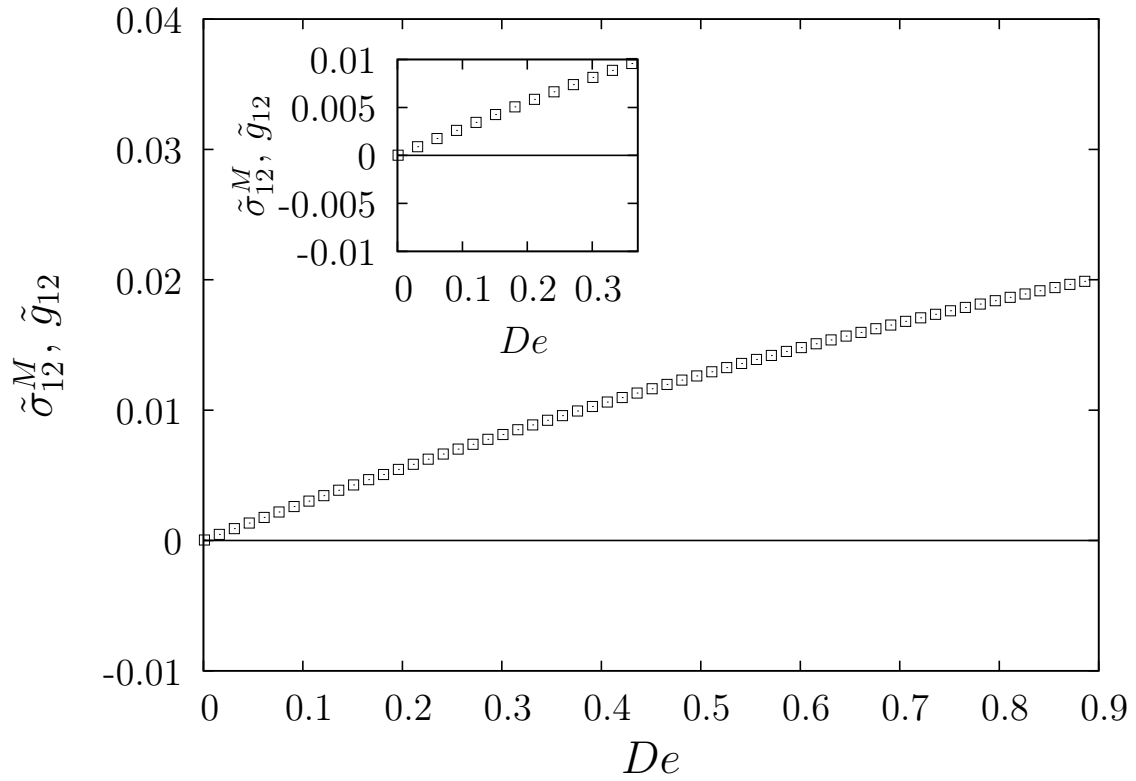


Figura 6.31: Conformação das macromoléculas para um escoamento oscilatório simples de pura rotação. Quadrados abertos representam a solução numérica da função $\tilde{\sigma}_{12}^M$ (eq. (6.78)) e na linha contínua tem-se a solução assintótica nula dada pela equação (6.77), ambas para um mesmo t^* fixo. No encarte tem-se com mais detalhes estas funções para De até 0.35, donde se vê que $\tilde{\sigma}_{12}^M < 1\%$. Parâmetros: $\phi = 400 \text{ ppm}$, $\tilde{\mu}_s = 17$, $\tilde{\omega} = 1$ e $L = 60$.

CAPÍTULO 7

ESCOAMENTO EM TUBO CAPILAR DE UM FLUIDO OLDROYD-B

Neste capítulo apresenta-se um estudo do escoamento de uma suspensão polimérica elástica submetido a gradientes de pressão. Inicialmente apresenta-se a formulação geral inicial e as condições de unidirecionalidade deste tipo de escoamento bem como o resultado clássico da vazão Q em regime de Poiseuille e o desvio da solução clássica na presença de efeitos elásticos do fluido. Para efeitos de estudos deste capítulo serão desprezados ainda efeitos da rugosidade da parede do tubo.

7.1 Formulação Geral – Escoamentos unidirecionais Axisimétricos

Inicialmente tem-se o campo de velocidade em coordenadas cilíndricas definido da maneira geral por:

$$\mathbf{u}(r, \theta, z) = (u_r(r, \theta, z); u_\theta(r, \theta, z); u_z(r, \theta, z)), \quad (7.1)$$

com $0 \leq z \leq C$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$ e $-R_T \leq r \leq R_T$, em que C é o comprimento total do tubo e R_T o raio deste (fixo). Como mostra a figura (7.1) as equações que governam escoamentos em tubos são formuladas em coordenadas cilíndricas.

O escoamento unidirecional axissimétrico em tubo de fluidos Newtonianos é designado também por escoamento quadrático devido ao seu perfil de velocidade ser descrito por uma equação de segundo grau em r . Este escoamento surge quando existe um gradiente de pressão axial que terá que vencer a resistência imposta pela viscosidade do fluido. Ao analisar o escoamento notamos que o mesmo apresenta simetria em relação ao eixo longitudinal (eixo z), e assim diz-se que o escoamento é axissimétrico e por isso suas derivadas em relação à direção θ serão nulas, i. e.,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \theta} = \mathbf{0}. \quad (7.2)$$

Assumi-se ainda que o escoamento é unidirecional e portanto o campo de velocidade não apresenta alterações na direção do eixo z , ou de outra forma, $\partial u_z / \partial z = 0$ (i.e., plenamente desenvolvido). Como não existe velocidade relativa na direção r a velocidade do fluido se anula na parede. Portanto $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ (i.e., condição de contorno de não deslizamento). Após estas considerações, a equação da quantidade de movimento (ver apêndice (II)) para a direção longitudinal (que é a direção do escoamento) reduz-se apenas:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \mu_s \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial r} \right), \quad (7.3)$$

em que μ_s é a viscosidade da suspensão polimérica, que neste caso é supostamente constante.

Aqui define-se o gradiente de pressão dado por:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{(p_C - p_0)}{C} = \frac{-\Delta p}{C}, \quad (7.4)$$

em que p_0 é a pressão no ponto inicial do tubo e p_C é a pressão no final do tubo, como $p_C < p_0$, então o termo $\partial p / \partial z$ é negativo. Defini-se $\partial p / \partial z = -G_p$, como sendo o negativo do gradiente de pressão, isto é, $\Delta p / C$ ao longo do tubo.¹ Assim levando em conta que $u_z = u_z(r)$, então pode-se escrever a equação (7.3) como:

$$-G_p \frac{r}{\mu_s} = \frac{d}{dr} \left(r \frac{du_z}{dr} \right). \quad (7.5)$$

¹Note que G_p possui unidade de Pa/m .

O perfil de velocidade é obtido obtido integrando-se por duas vezes a equação (7.5), com as seguintes condições de contorno: a velocidade é finita ao longo do eixo z , ou de forma equivalente, que a derivada da velocidade é nula no centro do tubo. Ainda assumi-se que a velocidade na parede do tubo é nula. Deste modo, com estas condições, o perfil de velocidade é dado pela equação de segundo grau:

$$u_z(r) = \frac{G_p}{4\mu_s}(R_T^2 - r^2). \quad (7.6)$$

Na figura (7.1) temos uma representação esquemática do escoamento num tubo, donde se vê as hipóteses aqui assumidas.

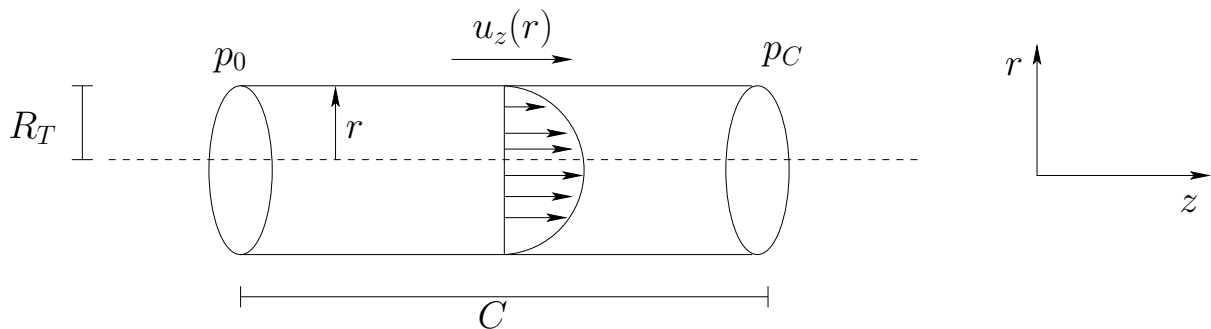


Figura 7.1: Representação esquemática do escoamento num tubo. R_T = raio do tubo (fixo). C = comprimento do tubo (fixo). $u_z(r)$ = perfil de velocidade desenvolvido.

Na figura (7.2) tem-se representado, a título de exemplo, quatro perfis de velocidade de $u_z(r)$. Aqui fixou-se² o valor de $\mu_s = 5 \text{ Pas}$ e variou-se o gradiente de pressão G_p . Assumiu-se também $R_T = 1 \text{ m}$ e o resultado do perfil de velocidade foi plotado para $-1 \text{ m} \leq r \leq 1 \text{ m}$. Percebe-se que sempre para $r = 0$ tem-se o valor máximo para a velocidade para cada G_p e que a velocidade máxima aumenta com o aumento deste parâmetro.

²Valor aleatório assim como os valores de G_p nesta figura

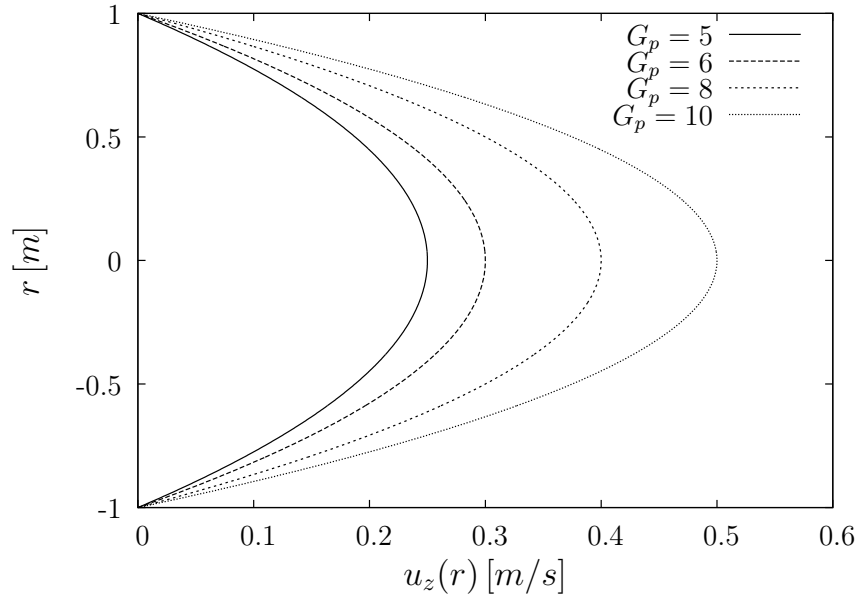


Figura 7.2: Perfis de velocidade de $u_z(r)$ para quatro valores distintos do gradiente de pressão ao longo do tubo.

A título de ilustração calcula-se agora a velocidade média, \bar{U} , no tubo. Sabe-se que \bar{U} é a metade da velocidade máxima no tubo e pode ser calculada pela lei:

$$\bar{U} = \frac{1}{\pi R_T^2} \int_0^{R_T} u_z(r) 2\pi r dr = \frac{G_p R_T^2}{8\mu_s}, \quad (7.7)$$

a última igualdade se deu pela substituição da equação (7.6).

A vazão Q é sem dúvida uma grandeza muito importante quando se estuda escoamentos em tubos. Esta quantidade mede a taxa volumétrica do líquido que entra (ou sai) de uma seção transversal do tubo em cada segundo, podendo ser calculada avaliando-se a velocidade na direção principal do escoamento. Deste modo tem-se sua definição expressa de forma matemática como sendo:

$$Q = \int_{\text{área}} \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS \quad (7.8)$$

em que $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor normal (à superfície onde esco o fluido) que aponta para o sentido do escoamento, neste caso $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{e}_3$. O símbolo dS representa o elemento de área, que aqui pode ser calculado por $\|d\mathbf{S}\| = dS = r dr d\theta$. Portanto tem-se que a vazão para o escoamento examinado é dada por:

$$Q = \int_0^{2\pi} \int_0^{R_T} u_z(r) r dr d\theta = \frac{\pi R_T^4 G_p}{8\mu_s} = \frac{-\Delta p \pi R_T^4}{8\mu_s C}. \quad (7.9)$$

A expressão (7.9) é o resultado clássico chamada de lei de Poiseuille.

7.1.1 Condição para a unidirecionalidade do escoamento em tubo – Análise de escalas

Apresenta-se nesta seção, com mais detalhe, o parâmetro que indica as condições em que o escoamento em tubo capilar de um fluido incompressível de viscosidade μ_s e massa específica ρ poderá ser considerado unidirecional. Vale resaltar que as equações apresentadas na seção anterior já levaram em consideração a unidirecionalidade.

Para a presente análise usa-se as seguintes escalas para este escoamento: $r \sim R_T$, $u_z \sim \bar{U}$ e $z \sim C \gg R_T$, em que R_T , \bar{U} e C são o raio do capilar, a velocidade média do escoamento e o comprimento do capilar, respectivamente.

Aplicando-se estas escalas a equação da continuidade (ver apêndice (II)) pode-se assegurar que,

$$u_r \sim \bar{U} \frac{R_T}{C}, \quad (7.10)$$

como o parâmetro $\frac{R_T}{C} \ll 1$, então pode-se desprezar a velocidade radial, isto é, u_r , deste modo tem-se $\partial u_z / \partial z = 0$, como já assumido na seção anterior. De acordo como o anexo (II) a equação do movimento na direção z , em coordenadas cilíndricas, será dada apenas por:

$$\rho \left(u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu_s \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \quad (7.11)$$

Efetuando-se a análise de escala na equação (7.11), tem-se primeiramente que o termo advectivo, $\rho u_r \frac{\partial u_z}{\partial r}$, associado com a inércia do escoamento é tal que,

$$\rho u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} \sim \rho \frac{\bar{U}^2}{C}. \quad (7.12)$$

Agora o termo difusivo (segundo termo do lado direito da equação (7.11)) é tal que,

$$\mu_s \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \sim \mu_s \frac{\bar{U}}{R_T^2}. \quad (7.13)$$

Agora ao se efetuar a divisão entre as duas escalas em (7.12) e (7.13) tem-se que o termo advectivo (ou inercial) é bastante inferior ao termo difusivo, concluindo que:

$$\frac{\rho \bar{U} R_T^2}{\mu_s C} = \frac{\rho \bar{U} R_T}{\mu_s} \left(\frac{R_T}{C} \right) \ll 1. \quad (7.14)$$

Deste modo, tem-se que o escoamento no tubo capilar será unidirecional, isto é, com a direção do escoamento sempre perpendicular ao seu gradiente, somente quando a equação

(7.14) for satisfeita. Pode-se definir ainda o número de Reynolds, Re , como sendo $Re = \rho \bar{U} R_T / \mu_s$ e assim a equação (7.14) pode ser reescrita na forma:

$$Re \left(\frac{R_T}{C} \right) \ll 1, \quad (7.15)$$

deste modo, a fim de se ter a unidirecionalidade, o número de Reynolds deve ser escolhido de maneira a se satisfazer a inequação (7.15). Vale mencionar que a condição (7.15) é também chamada de aproximação de lubrificação em alguns contextos da literatura [6].

A equação do movimento na direção z do tubo, em coordenadas cilíndricas, também pode ser escrita em função do tensor de tensões σ . Quando se considera a condição de unidirecionalidade e axissimetria e as equações do movimento do anexo (II), tem-se a seguinte equação:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial [r \sigma_{rz}]}{\partial r} = \frac{\partial p}{\partial z}, \quad (7.16)$$

em que σ_{rz} é a tensão de cisalhamento. Pode-se ainda escrever esta tensão em função da taxa de cisalhamento da forma

$$\sigma_{rz}(\dot{\gamma}) = \mu_s(\dot{\gamma}) \frac{du_z}{dr}. \quad (7.17)$$

Efetuando-se a integração da equação (7.16) e usando a definição dada pela equação (7.4), obtém-se:

$$\sigma_{rz} = -G_p \frac{r}{2}. \quad (7.18)$$

Ao substituir a equação (7.17) na equação (7.18) e ao se efetuar a integração com as mesmas condições de contorno descritas na seção anterior determina-se novamente a equação (7.6)

$$u_z(r) = \frac{G_p}{4\mu_s} (R_T^2 - r^2), \quad (7.19)$$

para o perfil de velocidade $u_z(r)$, onde $\mu_s(\dot{\gamma}) = \mu_s$.

7.1.2 Viscosidade na parede do tubo

Uma abordagem, mais utilizada experimentalmente, para se determinar a viscosidade de um fluido na parede de um tubo é descrita agora nesta seção. Esta viscosidade será denotada por μ_p , a qual é definida pela equação:

$$\mu_p = \frac{\sigma_p}{\dot{\gamma}_p}, \quad (7.20)$$

em que σ_p e $\dot{\gamma}_p$ são a tensão de cisalhamento e a taxa de cisalhamento avaliados na parede, respectivamente. Esta tensão σ_p é obtida através do equilíbrio das forças que agem em um volume de fluido devido ao gradiente de pressão e das forças associadas às tensões na parede que se opõem ao movimento do fluido. Matematicamente este balanço é de forças corresponde a:

$$(p_0 - p_C)\pi R_T^2 - 2\sigma_p\pi R_T C = 0, \quad (7.21)$$

ou simplesmente,

$$\sigma_p = \frac{(p_0 - p_C)R_T}{2C} = \frac{-\Delta p R_T}{2C}. \quad (7.22)$$

Usando-se a equação (7.18) nesta última equação tem-se a importante relação entre a tensão de cisalhamento em um ponto qualquer do escoamento e a tensão de cisalhamento na parede:

$$\frac{\sigma_{rz}}{\sigma_p} = -\frac{r}{R_T}. \quad (7.23)$$

Pode-se também determinar uma expressão para a taxa de cisalhamento na parede $\dot{\gamma}_p$. Para este fim, integra-se por partes a expressão da vazão dada pela equação (7.8), o que resulta na expressão

$$Q = -\pi \int_0^{R_T} r^2 \dot{\gamma}_p dr. \quad (7.24)$$

A equação (7.23) sugere a mudança de variável $r(\sigma) = -R_T\sigma/\sigma_p$ então $dr = (-R_T/\sigma_p) d\sigma$, aqui usou-se apenas $\sigma_{rz} = \sigma$. Após efetuar a integração da equação (7.24), com esta mudança de variável obtém-se a relação de Weissenberg-Rabinowitsch [8] dada pela equação (7.25)

$$\dot{\gamma}_p = \frac{1}{\sigma_p^2} \frac{d}{d\sigma_p} \left(\frac{Q\sigma_p^2}{\pi R_T^3} \right). \quad (7.25)$$

Por fim substituindo-se a equação (7.22) na equação (7.25) tem-se a expressão para o cálculo de $\dot{\gamma}_p$ dada por:

$$\dot{\gamma}_p = \frac{Q}{\pi R_T^3} \left(3 + \frac{d(\ln |Q|)}{d(\ln |\Delta p|)} \right). \quad (7.26)$$

A equação (7.22) juntamente com a equação (7.26), mostram que, uma vez determinada a vazão Q e a diferença de pressão Δp é possível avaliar a viscosidade de cisalhamento na parede para um escoamento unidirecional por meio de $\sigma_p = \mu_p \dot{\gamma}_p$, ou seja,

$$\mu_p = \frac{\sigma_p}{\dot{\gamma}_p}. \quad (7.27)$$

Neste trabalho, porém, usa-se apenas a abordagem numérica para o cálculo da viscosidade na parede. Ao final da próxima seção se verá como isso será feito.

7.2 Escoamento de um fluido Oldroyd-B em tubo capilar

Nesta seção, apresenta-se a formulação do escoamento em tubo capilar de um fluido segundo o modelo Oldroyd-B usado neste trabalho. A equação do movimento (II.22), nas condições de unidirecionalidade, pode ser reescrita para um líquido qualquer como:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\sigma_{rz}), \quad (7.28)$$

em que ρ é a massa específica do fluido e σ_{rz} é obtida da solução do par de equações dimensionais do modelo de fluido Oldroyd-B:

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = 2\mu_s(\phi)\mathbf{D} + nGf(r)\mathbf{B}(t), \quad (7.29)$$

e

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot (\nabla\mathbf{u})^T - \frac{2af(r)}{\tau\sqrt{\text{tr}(\mathbf{B})}} \left(\mathbf{B} - \frac{a^2}{3}\mathbf{I} \right). \quad (7.30)$$

Assim para se obter o campo de velocidade \mathbf{u} de um líquido elástico no tubo capilar é preciso resolver as equações (7.29) e (7.30) juntamente com a equação (7.28).

Neste momento faz-se conveniente apresentar uma nova proposta de adimensionalização das equações (7.29) e (7.30). Usam-se agora as seguintes escalas típicas: A velocidade média \bar{U} para a velocidade, $R_T =$ raio do tubo como comprimento, $\sigma_c = \mu\bar{U}/R_T$ como escala para a tensão e o tempo de relaxação τ como escala de tempo. Para a pressão usa-se: $p_c = \mu\bar{U}/R_T$. Desta maneira o número de Reynolds Re será dado por $Re = \rho\bar{U}R_T/\mu$ e o número de Deborah De será dado por $De = \tau\bar{U}/R_T$. Neste ponto vale destacar:

$$\tilde{C} = \frac{C}{R_T}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{\bar{U}}, \quad \tilde{r} = \frac{r}{R_T}, \quad \Delta\tilde{p} = \frac{\Delta p}{\Delta p_c}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau}, \quad Re = \frac{\rho\bar{U}R_T}{\mu}, \quad De = \frac{\tau\bar{U}}{R_T} \quad \text{e} \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_c}.$$

Na matrix abaixo apresenta-se³ o tensor taxa de deformação adimensional dado por $2\tilde{\mathbf{D}} = \tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} + (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T$, no caso do escoamento em tubo capilar, nas condições de unidirecionalidade:

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{r}} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{r}} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.31)$$

³Veja equação (II.32) no apêndice II.

Com estas considerações, as equações (7.29) e (7.30) ficarão podem ser reescritas na forma adimensional, como sendo:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\tilde{t}) = 2\tilde{\mu}_s(\phi)\tilde{\mathbf{D}} + \frac{9}{2}\phi\frac{f(R)}{De}\tilde{\mathbf{B}}(\tilde{t}), \quad (7.32)$$

e

$$\frac{d\tilde{\mathbf{B}}}{d\tilde{t}} = De\left[\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}} \cdot (\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}})^T\right] - \frac{2f(R)}{\sqrt{\text{tr}(\tilde{\mathbf{B}})}}\left(\tilde{\mathbf{B}} - \frac{1}{3}\mathbf{I}\right), \quad (7.33)$$

em que $f(R) = L^2/(L^2 - R^2)$, $R^2 = \text{tr}(\tilde{\mathbf{B}}) = \tilde{B}_{rr} + \tilde{B}_{\theta\theta} + \tilde{B}_{zz}$ e $\tilde{\mu}_s(\phi) = 1 + c\phi$. Aqui por comodidade escreve-se apenas $\tilde{\mu}_s$ ao invés de $\tilde{\mu}_s(\phi)$.

A equação (7.28) em sua forma adimensional, com estas escalas, é dada por:

$$Re\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{t}} = De\left[-\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{z}} + \frac{1}{\tilde{r}}\tilde{\sigma}_{rz} + \frac{\partial\tilde{\sigma}_{rz}}{\partial\tilde{r}}\right], \quad (7.34)$$

em que,

$$\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{z}} = -\tilde{G}_p = \frac{\Delta\tilde{p}}{\tilde{C}}. \quad (7.35)$$

Usando-se a equação (7.32) determina-se a componente $\tilde{\sigma}_{rz}$ do tensor $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ dada pela expressão:

$$\tilde{\sigma}_{rz}(\tilde{t}) = \tilde{\mu}_s\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{r}} + \frac{9}{2}\phi\frac{f(R)}{De}\tilde{B}_{rz}(\tilde{t}). \quad (7.36)$$

Neste ponto é preciso encontrar a solução para \tilde{B}_{rz} . Pela equação (7.33), tem-se o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias para a obtenção da função $\tilde{B}_{rz}(\tilde{t})$, dado por:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{B}_{rz}}{d\tilde{t}} = De\tilde{B}_{rr}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{r}} - 2\frac{f(R)}{R}\tilde{B}_{rz}(\tilde{t}); \\ \frac{d\tilde{B}_{zz}}{d\tilde{t}} = 2De\tilde{B}_{rz}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{r}} - 2\frac{f(R)}{R}\left(\tilde{B}_{zz}(\tilde{t}) - \frac{1}{3}\right); \\ \frac{d\tilde{B}_{rr}}{d\tilde{t}} = -2\frac{f(R)}{R}\left(\tilde{B}_{rr}(\tilde{t}) - \frac{1}{3}\right), \end{cases} \quad (7.37)$$

É imediato deduzir do sistema (7.37) que: $\tilde{B}_{rz} = \tilde{B}_{zr}$ e $\tilde{B}_{\theta\theta} = \tilde{B}_{rr}$. No presente problema do escoamento considera-se a condição em que o tensor $\tilde{\mathbf{B}}$ está em regime permanente, isto é, $d\tilde{\mathbf{B}}/d\tilde{t} = \mathbf{0}$. Deste modo pode-se concluir do sistema (7.37) as equações,

$$\begin{cases} \tilde{B}_{rr} = \tilde{B}_{\theta\theta} = \frac{1}{3}; \\ \tilde{B}_{rz} = \frac{De}{6L^2}\left(\frac{2}{3} + \tilde{B}_{zz}\right)^{1/2}\left[L^2 - \left(\frac{2}{3} + \tilde{B}_{zz}\right)\right]\left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{r}}\right); \\ \tilde{B}_{zz} = \frac{1}{3} + \frac{De^2}{6L^4}\left(\frac{2}{3} + \tilde{B}_{zz}\right)\left(L^2 - \frac{2}{3} - \tilde{B}_{zz}\right)^2\left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{r}}\right)^2. \end{cases} \quad (7.38)$$

Da última equação de (7.38) pode-se escrever a equação de terceiro grau em \tilde{B}_{zz} , como sendo:

$$\begin{aligned}
& 27De^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 \tilde{B}_{zz}^3 + \left[54De^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 - 54De^2 L^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 \right] \tilde{B}_{zz}^2 + \\
& + \left[27De^2 L^4 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 - 162L^4 - 72De^2 L^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 + 36De^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 \right] \tilde{B}_{zz} + \\
& + \left[18De^2 L^4 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 - 24De^2 L^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 + 8De^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 + 54L^4 \right] = 0. \quad (7.39)
\end{aligned}$$

Esta equação (7.39) é da maior relevância para se calcular a solução numérica do escoamento apresentado nas seções subsequentes. Finalmente substituindo-se a segunda equação do sistema (7.38) na equação (7.36) e o resultado desta operação substituindo-se na equação (7.34), obtém-se então a equação governante final a ser resolvida, dada por:

$$Re \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} = De \left\{ \tilde{G}_p + \left[\frac{\tilde{\mu}_s}{\tilde{r}} + \frac{3\phi R}{4\tilde{r}} \right] \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} + \tilde{\mu}_s \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{r}^2} \right\}, \quad (7.40)$$

em que agora $R(\tilde{t}) = \sqrt{2/3 + \tilde{B}_{zz}(\tilde{t})}$.

Propõe-se também uma solução assintótica para a equação (7.40). Para isto, assume-se $Re = 0$ e $De \ll 1$, assim $De^2 \approx 0$, e a equação (7.39) se reduz a:

$$-162L^4 \tilde{B}_{zz} + 54L^4 \approx 0 \Rightarrow \tilde{B}_{zz} \approx \frac{1}{3}. \quad (7.41)$$

Desta maneira considera-se, como nos escoamentos anteriormente estudados nesta tese, que $R \approx 1$. Com esta hipótese a equação (7.40) ficará, para $Re = 0$ e $De \ll 1$:

$$\tilde{G}_p + \left[\frac{\tilde{\mu}_s}{\tilde{r}} + \frac{3\phi}{4\tilde{r}} \right] \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} + \tilde{\mu}_s \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{r}^2} = 0, \quad (7.42)$$

que com as mesmas condições de contorno, $\tilde{u}(1) = 0$ e $d\tilde{u}/d\tilde{r}(0) = 0$, possui a seguinte solução analítica:

$$\tilde{u}(\tilde{r}) = \frac{2\tilde{G}_p}{(8\tilde{\mu}_s + 3\phi)} (1 - \tilde{r}^2). \quad (7.43)$$

Ressalta-se que a equação (7.43) só é a solução analítica para uma suspensão polimérica diluída, i.e., $\phi \ll 1$, sujeita a um escoamento fraco no qual $De \ll 1$. É importante notar que neste regime a solução para \tilde{u} ainda possui um perfil parabólico, como se vê na figura (7.2). De fato, ainda percebe-se a medida que se aumenta a fração volumétrica ϕ (e conseqüentemente a viscosidade adimensional $\tilde{\mu}_s$), a velocidade máxima neste caso tende a diminuir.

Antes de prosseguir, para resolver numericamente a equação (7.40), usa-se a vazão (da equação (7.8)) em sua forma adimensional de modo que esta seja sempre constante e igual a unidade, i.e.,:

$$\tilde{Q} = 2 \int_0^1 \tilde{u}(\tilde{r}) \tilde{r} d\tilde{r} = 1. \quad (7.44)$$

Como usar-se a velocidade média típica \bar{U} e a área da seção transversal do tubo $A = \pi R_T^2$ (que é constante) como escalas de velocidade e área, respectivamente, $Q_c = \bar{U} A$ ficará sendo a escala característica da vazão. Desta maneira tem-se sempre $\tilde{Q} = Q/Q_c = 1$, independente se o fluido analisado for newtoniano ou não.

Da equação (7.44), conclui-se que uma condição necessária e suficiente para que a vazão adimensional seja constante e igual a unidade, é que:

$$\tilde{Q} = 1 \iff \int_0^1 \tilde{u}(\tilde{r}) \tilde{r} d\tilde{r} = \frac{1}{2}. \quad (7.45)$$

Chama-se esta integral por integral da vazão a qual será denotada por \mathbb{I}_V . Esta condição, por sua vez, é usada como um critério de convergência para a integração numérica proposta a seguir.

Retornando novamente a lei de Poiseuille (equação (7.9)), em sua forma adimensional, tem-se uma importante relação entre \tilde{Q} e \tilde{G}_p dada por:

$$Q = \frac{-\Delta p \pi R_T^4}{8\mu_s C} \Rightarrow Q = \frac{-\Delta \tilde{p} \mu (\bar{U}/R_T) \pi R_T^4}{8\mu_s C} \Rightarrow \tilde{Q} = \frac{\tilde{G}_p}{8\tilde{\mu}_s}. \quad (7.46)$$

Como usa-se $\tilde{Q} = 1$, logo a equação (7.46) define que:

$$\tilde{G}_p = 8\tilde{\mu}_s. \quad (7.47)$$

Deste modo, na hipótese de se ter apenas o fluido base newtoniano de viscosidade μ escoando no tubo, i.e., no caso $\phi = 0$, implica que $\tilde{\mu}_s = 1 + c\phi = 1$ e conseqüentemente $\tilde{G}_p = 8$.

Para concluir esta seção, mostra-se como será feito o cálculo numérico da viscosidade adimensional do fluido na parede do tubo. Considere a equação (7.22) em sua forma adimensional, a tensão adimensional na parede é dada por:

$$\tilde{\sigma}_p = \frac{-\Delta \tilde{p}}{2\tilde{C}} = \frac{\tilde{G}_p}{2}. \quad (7.48)$$

Sabe-se que a taxa de cisalhamento adimensional numérica avaliada na parede é dada por:

$$\tilde{\gamma}_p = \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right) \Big|_{\tilde{r}=1}, \quad (7.49)$$

pode-se considerar, ainda, $\tilde{\gamma}_p$ como sendo o número de Deborah na parede, e escreve-se $\tilde{\gamma}_p = De_p$.

Pode ocorrer que em $\tilde{r} = 1$ se tenha $\tilde{\gamma}_p < 0$, por este motivo usa-se o módulo da taxa de cisalhamento na parede. Deste modo tem-se, finalmente, a expressão para a viscosidade adimensional, determinada de modo numérico, na parede do tubo como sendo:

$$\tilde{\mu}_p = \frac{\tilde{\sigma}_p}{|\tilde{\gamma}_p|} = \frac{\tilde{G}_p}{2|\tilde{\gamma}_p|}. \quad (7.50)$$

7.3 Procedimento Numérico e testes preliminares

Apresenta-se nesta seção os resultados numéricos para este tipo de fluido num escoamento capilar. Para esta finalidade se resolverá a equação (7.40), onde agora os parâmetros de entrada que irão variar serão: o número de Deborah De , a fração volumétrica ϕ , a extensibilidade máxima das macromoléculas dada por L e o gradiente de pressão adimensional \tilde{G}_p . O número de Reynolds Re será assumido sempre igual a zero, $Re = 0$, desde que explora-se apenas o regime permanente do escoamento axissimétrico.

Da equação (7.40) tem-se a impressão de que De não é relevante. Porém note que para se resolver numericamente a equação (7.40) é preciso conhecer o valor de $R = \sqrt{2/3 + \tilde{B}_{zz}}$ e, para isto, resolve-se a equação (7.39) para se determinar o valor de \tilde{B}_{zz} . Note, por fim, que para se resolver a equação (7.39) é necessário entrar com os valores de De e L (como feito ao longo do trabalho), e mais, é inescusável entrar também com uma condição inicial para a velocidade $\tilde{\mathbf{u}}$, na qual, conseqüentemente, tira-se a condição inicial para a derivada $\partial\tilde{\mathbf{u}}/\partial\tilde{r}$. O campo de velocidade inicial a ser considerado nas simulações numéricas será o do regime de Poiseuille. Por convenção, adote: $\partial\tilde{\mathbf{u}}/\partial\tilde{r} = d\mathbf{u}$.

Com estes dados iniciais de entrada ($\tilde{\mathbf{u}}^i, d\mathbf{u}^i, L, De, \tilde{G}_p, \phi$) resolve-se iterativamente, pelo método de Newton, a equação (7.39) e com o valor encontrado de \tilde{B}_{zz}^i determina-se o valor de $R^i = \sqrt{2/3 + \tilde{B}_{zz}^i}$. Logo em seguida resolve-se iterativamente, por diferenças finitas, a equação (7.40) de onde se determina o novo vetor velocidade $\tilde{\mathbf{u}}^n$. Neste ponto impõe-se a condição lógica: $\|\tilde{\mathbf{u}}^i - \tilde{\mathbf{u}}^n\| < 10^{-6}$? Se sim, então calcula-se a integral \mathbb{I}_V na equação (7.45); se não, $\tilde{\mathbf{u}}^i$ é atualizado pelo vetor $\tilde{\mathbf{u}}^n$ e todo o processo é iniciado novamente, até se alcançar a tolerância 10^{-6} desejada.

Convergido o vetor velocidade $\tilde{\mathbf{u}}$, tem-se que verificar a condição da vazão ser igual a unidade, e para isso assumi-se apenas uma tolerância de erro em torno de 10^{-3} para o cálculo da vazão, que será averiguada pelo cálculo da integral \mathbb{I}_V da equação ⁴ (7.45), como já fora analisado. Logo, se o gradiente de pressão \tilde{G}_p assumido no início do processo descrito acima não nos der $\mathbb{I}_V = 0.5 \pm 10^{-3}$, então deverá ser dado um novo gradiente de pressão \tilde{G}_p^* tal que $\mathbb{I}_V(\tilde{G}_p^*) = 0.5 \pm 10^{-3}$. Neste ponto usa-se o método da bisseção para se encontrar \tilde{G}_p^* . Para isto usa-se \tilde{G}_p^1 e \tilde{G}_p^2 no procedimento numérico descrito acima de modo que $\mathbb{I}_V^1(\tilde{G}_p^1) > 0.5$ e $\mathbb{I}_V^2(\tilde{G}_p^2) < 0.5$, e neste passo usa-se o método da bisseção para encontrar $\tilde{G}_p^* = (\tilde{G}_p^1 + \tilde{G}_p^2)/2$. Se ainda não se tem satisfeita a condição $\mathbb{I}_V(\tilde{G}_p^*) = 0.5 \pm 10^{-3}$, então usa-se o novo $\tilde{G}_p^* = \tilde{G}_p^1$ ou $\tilde{G}_p^* = \tilde{G}_p^2$ e inicia-se todo o processo numérico novamente, com as devidas atualizações, até que o mesmo venha a convergir, dentro das margens de erro estabelecidas.

7.3.1 Escoamento na ausência das macromoléculas

Nesta seção mostra-se o perfil de velocidade do escoamento capilar nas condições até aqui assumidas e ainda propõe-se resolver a equação (7.40) na hipótese de se ter um fluido na ausência das macromoléculas, i.e., no caso de se ter $\phi = 0$ e então $\tilde{\mu}_s = 1 + c\phi = 1$. Desta maneira deve-se utilizar $\tilde{G}_p = 8\tilde{\mu}_s = 8$, para se obter $\mathbb{I}_V = 0.5 \pm 10^{-3}$, como visto na equação (7.45). Deste modo a equação (7.40) ficará apenas:

$$8 + \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{r}^2} = 0, \quad (7.51)$$

para todo valor do parâmetro De . Sabe-se ainda que a equação (7.51) possui solução analítica adimensional. Para isso basta adimensionalizar a equação (7.6), e obter:

$$\tilde{u}(\tilde{r}) = \frac{\tilde{G}_p}{4} (1 - \tilde{r}^2) = 2(1 - \tilde{r}^2), \quad (7.52)$$

pois $\tilde{G}_p = 8$.

Na figura (7.3) mostra o perfil de velocidade $\tilde{u}(\tilde{r})$ obtido via integração numérica pelo método de diferenças finitas da equação (7.51). O que se faz é utilizar $\tilde{G}_p = 8$ e encontrar o perfil de velocidade \tilde{u} e em seguida substitui-se este perfil de velocidade \tilde{u} na equação (7.45) de onde determinou-se que $\mathbb{I}_V = 0.49990$.

⁴Esta integral será determinada numericamente pela regra dos trapézios.

Na figura (7.3) tem-se um perfil perfeitamente parabólico para a velocidade, visto que para $\phi = 0$ não se têm a presença dos efeitos elásticos das macromoléculas⁵ na resposta do escoamento do fluido, e o que se vê é apenas o comportamento de um fluido Newtoniano num capilar, na condição de um escoamento unidirecional com $\tilde{G}_p = 8$. É claro que $|\tilde{\gamma}_p| = 4$ em $\tilde{r} = 1$ e assim, pela equação (7.50), a viscosidade na parede é $\tilde{\mu}_p = 1 = \tilde{\mu}_s$, uma vez que $\phi = 0$. Esse teste preliminar encontrando o perfil parabólico clássico como uma referência, mostra que a metodologia numérica está funcionando corretamente e apresenta convergência com excelente acurácia.

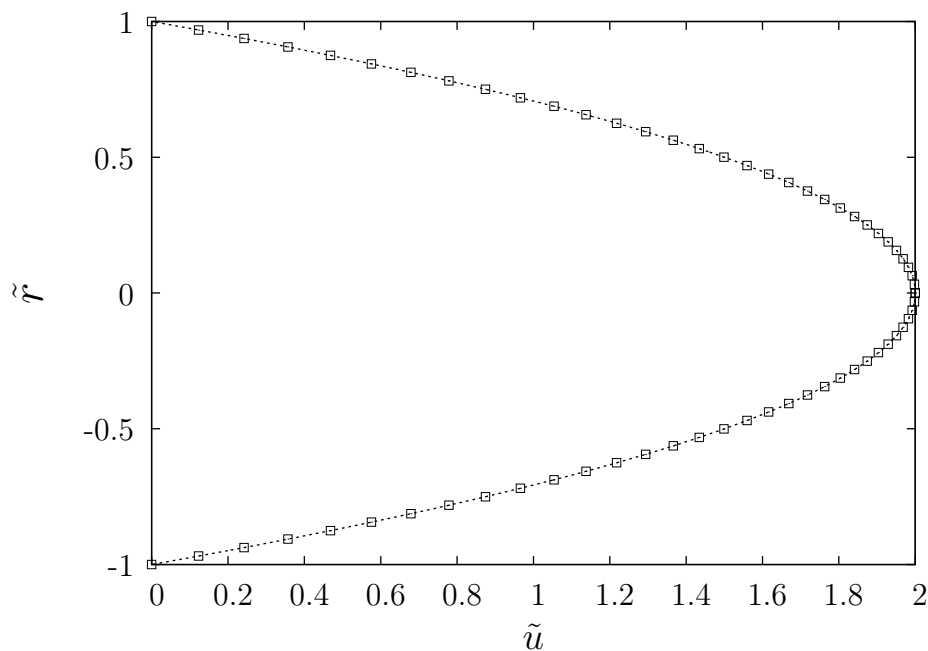


Figura 7.3: Perfil de velocidade de um fluido na ausência de macromoléculas. Na linha pontilhada tem-se a solução analítica dada pela equação (7.52). Quadrados abertos denotam a solução numérica da equação (7.51). Parâmetros: $\tilde{G}_p = 8$, $Re = 0$, $L = 60$, $\phi = 0$ e determinou-se que $\mathbb{I}_V = 0.49990$.

7.3.2 Resultados numéricos com a presença das macromoléculas

Nesta seção pretende-se analisar o desvio do perfil parabólico de velocidade a medida que se aumenta o número de Deborah, i.e., à medida que os efeitos elásticos das macromoléculas começam a se tornar relevantes juntamente com o efeito viscoso. Como foi visto ao longo

⁵Uma vez que elas estão ausentes.

deste trabalho, isto será possível com o aumento do parâmetro De . Como se viu na terceira equação do sistema (7.38), existe o coeficiente $De^2/(6L^4)$, por isto ao longo desta seção será sempre usado $L = 3.5$ a fim de que $De^2/(6L^4)$ não seja uma contribuição de segunda ordem à medida que De aumenta dentro de uma faixa fisicamente razoável.

A figura (7.4) mostra o perfil de velocidade para um fluido com fração volumétrica $\phi = 400 \text{ ppm} = 4 \times 10^{-4}$ e Deborah igual a 0.01. Nestas condições, nas vizinhanças do equilíbrio nota-se que os efeitos elásticos das macromoléculas e os efeitos devido à alteração da viscosidade da suspensão polimérica são praticamente imperceptíveis, o que acarreta numa invariância do perfil de velocidade. Vale ressaltar que, foi necessário usar $\tilde{G}_p = 8.08$ na simulação numérica a fim de se obter $\mathbb{I}_V = 0.49984$. Como usa-se um regime muito diluído para $De = 0.01 \ll 1$ mostra-se ainda na figura (7.4) uma boa concordância com as soluções para o caso $\phi = 0$ e a solução do regime assintótico dado pela equação (7.43). Tem-se ainda que a velocidade máxima ($\tilde{u}_{max} = \tilde{u}(0)$) é igual a: $\tilde{u}_{max} = 2$ pela equação (7.52); $\tilde{u}_{max} \approx 1.999703$ pela equação (7.43); e $\tilde{u}_{max} \approx 1.999512$ pela solução numérica da equação (7.40).

Determinou-se ainda que o módulo da derivada na parede (em $\tilde{r} = 1$) para este fluido, foi $|\tilde{\gamma}_p| = \partial\tilde{u}/\partial\tilde{r} \approx 4.023$. Assim a viscosidade na parede pode ser calculada pela equação (7.50), o que nos dá, aproximadamente, $\tilde{\mu}_p \approx 1.0042 \approx 1$. Numericamente falando o caso $De = 0.01$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ é muito próximo do caso da seção (7.3.1) ($\phi = 0$). Diante disto e da figura (7.4) constata-se que será preciso incrementar valores de ϕ e De de maneira considerável para se notar um desvio significativo do perfil parabolóico da velocidade em virtude de efeitos elásticos ou de relaxação no escoamento.

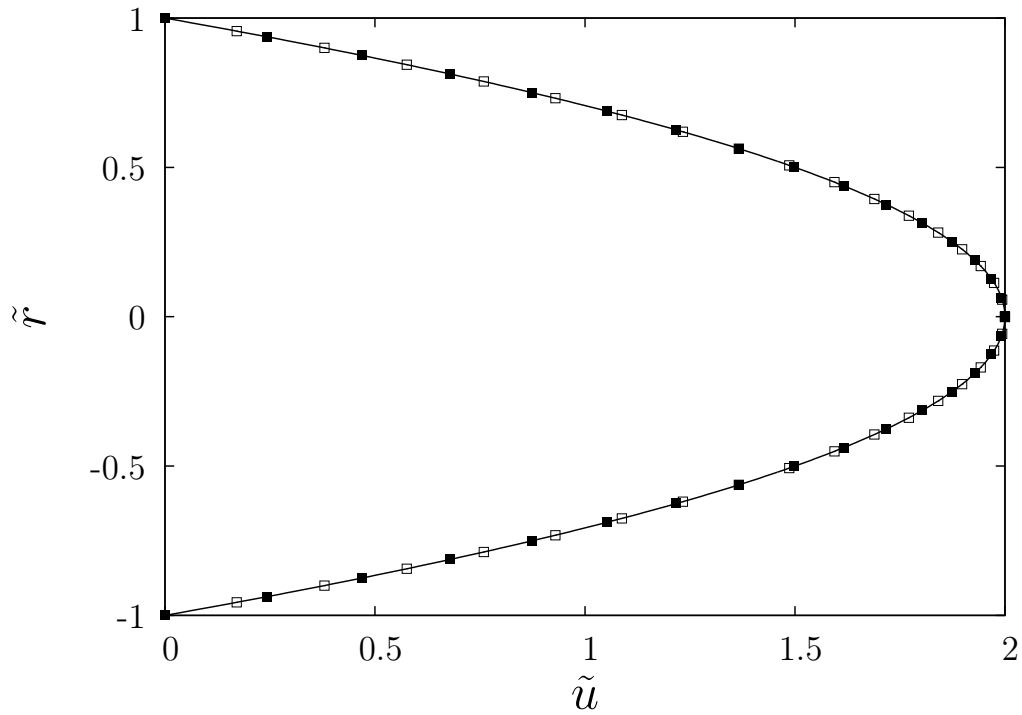
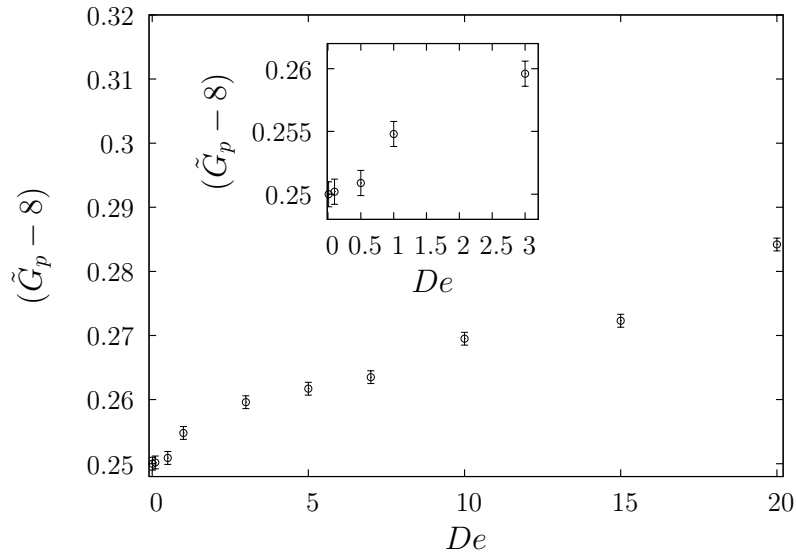


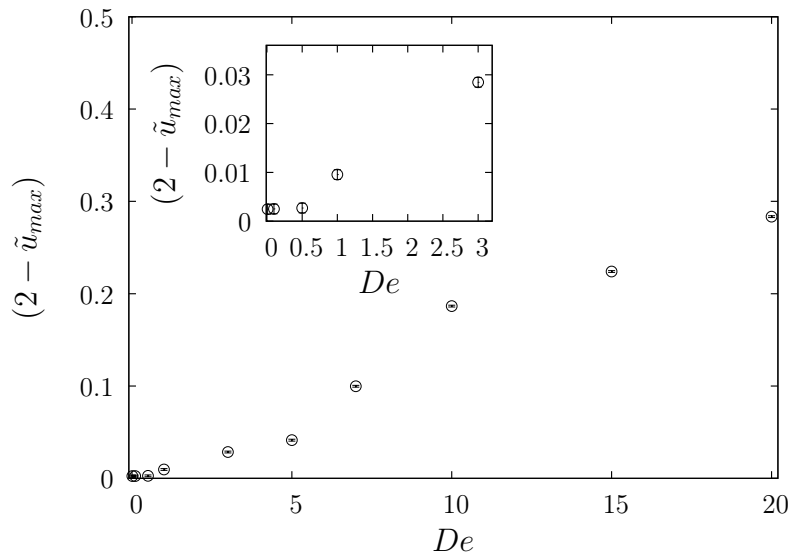
Figura 7.4: Perfil de velocidade \tilde{u} . Na linha contínua tem-se a solução analítica para o caso $\phi = 0$ dada pela equação (7.52) em que $\tilde{G}_p = 8$. Os quadrados abertos representam a solução numérica para $\phi = 400 \text{ ppm}$, $De = 0.01$ e $\tilde{G}_p = 8.08$. Os quadrados fechados representam a solução assintótica dada pela equação (7.43). Foi calculado $\mathbb{I}_V = 0.49984$. Parâmetros: $De = 0.01$, $L = 3.5$, $Re = 0$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$.

Para se ter desvios perceptíveis no perfil parabólico de velocidade é necessário uma seleção dos parâmetros do escoamento que combinados produzam efeitos não-Newtonianos ou não-lineares. Com este fim considera-se uma suspensão polimérica a um por cento, i.e., $\phi = 1\% = 0.01 \ll 1$ para $L = 3.5$ fixo. A figura (7.5)(a) mostra o aumento do gradiente de pressão adimensional \tilde{G}_p à medida que se aumenta o número de Deborah já na figura (7.5)(b) observa-se porém que a velocidade máxima, \tilde{u}_{max} , diminui de forma substancial com o aumento de De .

Na tabela (7.1) tem-se representado os valores da figura (7.5), onde na quarta coluna vê-se o valor numérico da integral \mathbb{I}_V calculado para cada valor do número de Deborah simulado. Note que sempre se tem $\mathbb{I}_V \approx 0.5$, com erro menor que 10^{-3} o que atesta uma excelente precisão na integração numérica. Relembre-se que na figura (7.4) foi preciso utilizar $\tilde{G}_p = 8.08$, no caso em que $De = 0.01$ e $\phi = 400 \text{ ppm}$ donde se obteve $\mathbb{I}_V = 0.49984$. Agora, da primeira linha da tabela (7.1) conclui-se que foi preciso utilizar $\tilde{G}_p = 8.25$ para o mesmo valor de $De = 0.01$ e uma fração volumétrica $\phi = 0.01$. Obteve-se $\mathbb{I}_V = 0.49939$ (precisão exata até a terceira casa decimal como o caso anterior). Portanto, para uma suspensão polimérica mais concentrada foi necessário aumentar, em aproximadamente, 3% o valor de \tilde{G}_p para o mesmo valor de De .



(a) $(\tilde{G}_p - 8) \times De$



(b) $(2 - \tilde{u}_{max}) \times De$

Figura 7.5: Variação do gradiente de pressão relativo adimensional $(\tilde{G}_p - 8)$ e da velocidade máxima relativa $(2 - \tilde{u}_{max})$, ambos em função do número de Deborah. Nos círculos abertos em (a) tem-se a comparação entre $(\tilde{G}_p - 8)$ e De . Em (b), nos círculos abertos, tem-se a comparação entre De e a velocidade máxima relativa dada por $(2 - \tilde{u}_{max})$. Parâmetros: $\phi = 0.01$ e $L = 3.5$.

Tabela 7.1: Valores numéricos de $(\tilde{G}_p - 8)$ e da velocidade máxima relativa $(2 - \tilde{u}_{max})$ para vários valores de De . Parâmetros: $\phi = 0.01$ e $L = 3.5$.

| De | $\tilde{G}_p - 8$ | $2 - \tilde{u}_{max}$ | \mathbb{I}_V |
|------|-------------------|-----------------------|----------------|
| 0.01 | 0.2500 | 0.002453 | 0.49939 |
| 0.1 | 0.2502 | 0.002499 | 0.49940 |
| 0.5 | 0.2509 | 0.002611 | 0.49948 |
| 1.0 | 0.2548 | 0.009127 | 0.49967 |
| 3.0 | 0.2596 | 0.028472 | 0.49992 |
| 5.0 | 0.2617 | 0.041343 | 0.49987 |
| 7.0 | 0.2635 | 0.099703 | 0.49993 |
| 10.0 | 0.2693 | 0.186528 | 0.49977 |
| 15.0 | 0.2784 | 0.224048 | 0.49990 |
| 20.0 | 0.2842 | 0.283502 | 0.49988 |

Na figura (7.6) tem-se representado três perfis de velocidade para três valores diferentes do parâmetro De para $\phi = 0.01$ e $L = 3.5$ fixos. Para o caso $De = 0.01$ ainda observa-se o perfil parabólico como visto anteriormente. Para $De = 10$ e $De = 20$ tem-se agora desvios bem consideráveis do perfil parabólico Newtoniano. Verifica-se que a velocidade máxima nestes dois últimos casos são menores que 2 ($\tilde{u}_{max} = 2$ no caso $\phi = 0$) e suas características físicas já se assemelham a perfis de velocidade de um escoamento turbulento, comum também ao perfil de velocidade de um fluido *power-law* [33]. O resultado da figura (7.6) mostra que para números de $De = 10$ e $De = 20$ os efeitos não-Newtonianos no escoamento emergem. Um comportamento pseudoplástico é evidente desde que como este é um escoamento no qual existe um gradiente de taxa de cisalhamento onde essa taxa é menor no centro do tubo, conseqüentemente a viscosidade da suspensão polimérica é nesta região maior produzindo o achatamento observado no perfil de velocidade. Esse comportamento é uma consequência direta do estiramento das macromoléculas ao longo das linhas de corrente do escoamento. Efeito esse que é mais pronunciado com o aumento do número de Deborah.

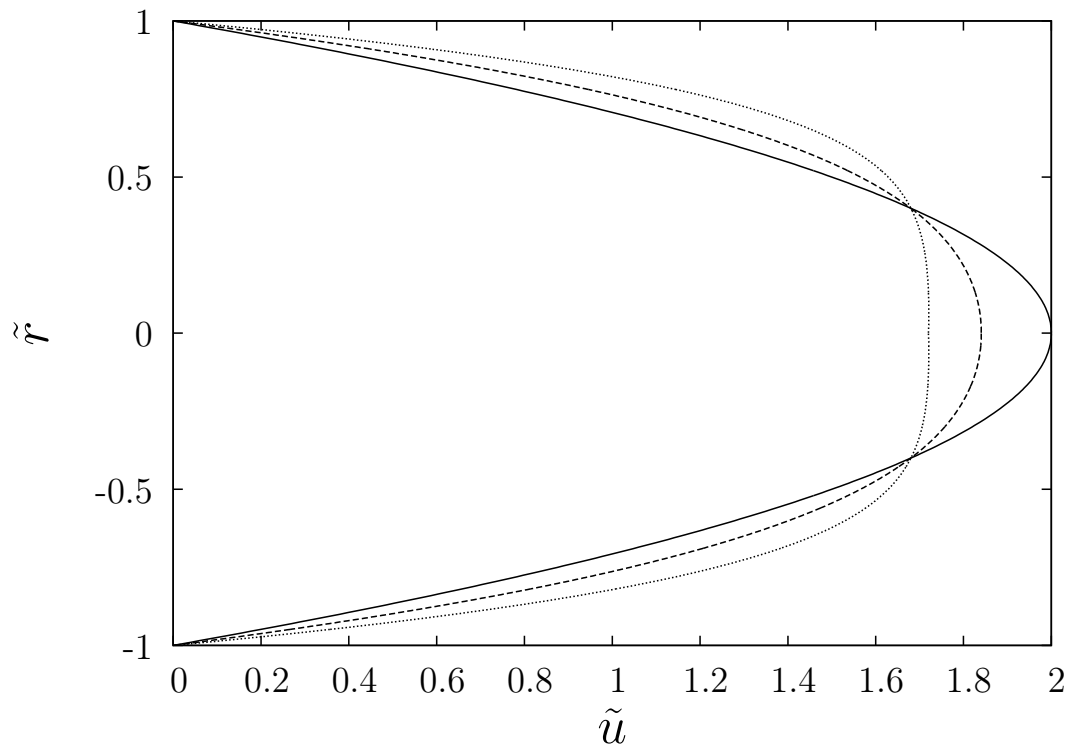
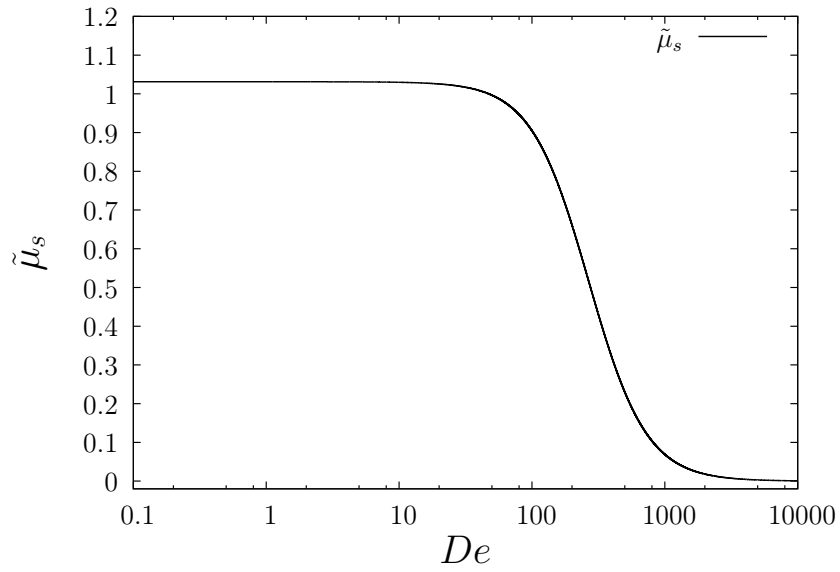
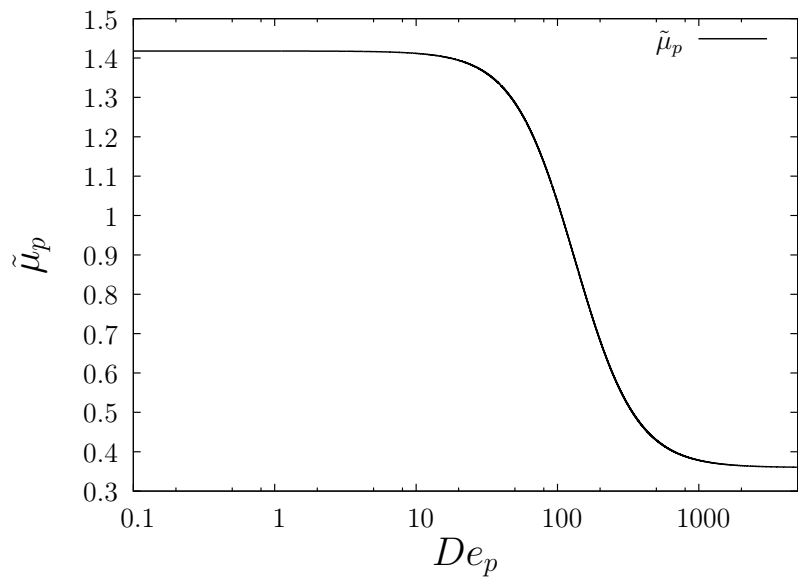


Figura 7.6: Perfil de velocidade \tilde{u} para três valores do parâmetro De . Na linha contínua tem-se o caso $De = 0.01$ onde $\tilde{u}_{max} = 1.9975 \approx 2$. Na linha pontilhada do meio tem-se o caso $De = 10$ onde $\tilde{u}_{max} \approx 1.8134$. E na linha pontilhada mais interna tem-se o caso $De = 20$ onde $\tilde{u}_{max} \approx 1.7165$. Parâmetros considerados: $L = 3.5$ e $\phi = 0.01$.

Na figura (7.7) apresenta-se o resultado da comparação entre as viscosidades aparente intrínseca da suspensão polimérica $\tilde{\mu}_s$ e a viscosidade na parede do tubo $\tilde{\mu}_p$. Estas viscosidades são calculadas pelas equações (7.47) e (7.50), respectivamente. Perceba-se na figura (7.7) que ambas as viscosidades apresentam o efeito pseudo-plástico e que $\tilde{\mu}_p > \tilde{\mu}_s$. Note-se ainda que a viscosidade intrínseca do fluido $\tilde{\mu}_s$ requer de um De ainda maior para atingir o patamar no regime $\tilde{\mu}_\infty$ e que a região $\tilde{\mu}_0$ (platô Newtoniano) foi levemente menor para $\tilde{\mu}_s$. Estes dois últimos casos ocorreram devido ao fato de que os efeitos de parede são mais realísticos para se medir a viscosidade efetiva de um fluido. De fato ao se considerar o valor de De global assumi-se todo o perfil de velocidade, onde sabe-se que existem regiões neste perfil de velocidade em que a taxa de cisalhamento local ou De local se anula (isto $\tilde{A}\textcircled{C}$, no centro do tubo). Por outro lado ao se considerar o Deborah de parede $De_p = |\partial\tilde{u}/\partial\tilde{r}|$ em $\tilde{r} = 1$, tem-se portanto um valor fixo de De_p correspondendo a taxas de cisalhamento máxima. A viscosidade de parede $\tilde{\mu}_p$ também será mais apropriada para se comparar com medidas da viscosidade do fluido pelo cisalhamento simples, por exemplo.



(a) $\tilde{\mu}_s$



(b) $\tilde{\mu}_p$

Figura 7.7: Comportamento pseudoplástico das viscosidades aparente intrínseca e na parede de uma suspensão polimérica. Em (a) tem-se a viscosidade aparente intrínseca, $\tilde{\mu}_s$, em função do número de De . Em (b) tem-se a viscosidade na parede $\tilde{\mu}_p$ em função do número de Deborah de parede, De_p . Parâmetros: $L = 3.5$ e $\phi = 0.01$.

CAPÍTULO 8

CONCLUSÕES

8.1 Sobre alguns resultados

Inicialmente apresentou-se uma pequena revisão bibliográfica da teoria de fluidos não Newtonianos mostrando o desenvolvimento de alguns modelos constitutivos que descrevem fluidos viscoelásticos. Viu-se que em alguns casos como modelos constitutivos não lineares podem ser construídos a partir da teoria da viscoelasticidade linear. Em seguida o presente trabalho realizou-se a análise de algumas propriedades reológicas de suspensões poliméricas, formada pelo fluido base ou solvente de viscosidade μ adicionada a um polímero de alto peso molecular, em regime diluído ($\phi \ll 1$). A suspensão foi submetida a vários tipos de escoamentos tanto permanentes como transientes (oscilatórios), no regime de pequenas e grandes deformações.

No que se diz respeito a modelagem matemática um par de equações constitutivas (formando um sistema fechado) foi apresentado baseando-se numa análise de escala e condições de equilíbrio termodinâmico no qual foi considerado um balanço entre as forças viscosas de arrasto e forças devido ao movimento Browniano (forças restauradoras). O modelo constitutivo analisado foi baseado no tipo Dumbbell-FENE (esfera-mola) o qual descreve o comportamento microscópico da macromolécula através da evolução temporal do tensor

conformação **B**. Viu-se que era necessário descobrir inicialmente a solução do tensor **B** e uma vez de posse desta solução juntamente com a equação constitutiva do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ era possível caracterizar alguns comportamentos reológicos do fluido. Vale ressaltar que duas correções foram incorporadas ao modelo constitutivo. A primeira referia-se a correção de mola não-linear na qual uma restrição na elongação máxima da macromolécula foi imposta de onde surgiu o parâmetro L . A segunda foi associada a uma correção do arrasto viscoso para levar em consideração a configuração da macromolécula deformada, de onde desta-se o surgimento do tempo de relaxação τ .

O parâmetro adimensional de maior relevância deste trabalho foi o número de Deborah (De), este estabelecia uma razão entre duas escalas de tempo: a microestrutural do fluido, denotada por tempo de relaxação τ das macromoléculas e um tempo característico do escoamento, aqui adotado como $t_f = 1/\dot{\gamma}$ ou $t_f = 1/\dot{\epsilon}$ no caso do escoamento extensional. O modelo constitutivo foi adimensionalizado sob uma nova proposta, levando-se em conta o tempo de relaxação principal τ_p e a viscosidade do fluido base μ da suspensão polimérica. Nos escoamentos de cisalhamento simples, oscilatório simples e impulso de deformação considerou-se o modelo de Cross adimensional para se trabalhar com a viscosidade adimensional da suspensão polimérica $\tilde{\mu}_s$, onde esta era função do parâmetro De , i.e., $\tilde{\mu}_s = \tilde{\mu}_s(De)$. Nos casos permanentes e transientes do cisalhamento extensional considerou-se a aproximação linear de Einstein em função da fração volumétrica ϕ para a adimensionalização da viscosidade polimérica μ_s , pois os resultados numéricos mostraram-se mais adequados à física do problema para estes tipos de escoamentos.

Foram realizados experimentos no laboratório de Reologia e Microhidrodinâmica do Grupo Vortex na Universidade de Brasília-UnB, utilizando-se do robusto aparelho Reômetro modelo Physica MCR-301 onde medidas reológicas de interesse foram medidas e obtidas de uma amostra da suspensão aquosa polimérica de poliácridamida aniônica PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 \text{ ppm}$ a uma temperatura constante de 20°C . Aqui destaca-se a obtenção do comportamento pseudo-plástico da viscosidade adimensional em função da taxa de cisalhamento adimensional número de Deborah De . A verificação da dependência quadrática da primeira diferença de tensões normais com De também foi verificada experimentalmente, isto é, $N_1(De) = KDe^2$. E por fim foram encontrados os módulos viscoelásticos η' , η'' , G' e G'' em função da frequência ω . Analisou-se o comportamento da

variação da viscosidade polimérica da PAMA também em função da fração volumétrica ϕ na qual determinou-se o coeficiente c , da relação linear de Einstein $\mu_s = \mu_w(1 + c\phi)$, como sendo $c = 1.53 \times 10^5$. Através do escoamento experimental por passo de deformação aplicada foi determinada a função relaxação de tensão Φ para uma suspensão de PAMA a fração volumétrica de $\phi = 400 \text{ ppm}$ a 20°C , onde observou-se que Φ segue o modelo de um fluido de Maxwell.

No âmbito matemático, foram determinadas soluções assintóticas no regime de pequenas deformações, isto é, $De \ll 1$, para os escoamentos de: cisalhamento simples, oscilatório simples, extensional permanente, extensional oscilatório e para o escoamento no tubo capilar. As soluções assintóticas foram determinadas, em especial, para as seguintes grandezas reológicas: primeira diferença de tensões normais N_1 , tensão de cisalhamento σ_{12} , viscosidade extensional μ_e e para os módulos viscoelásticos η' e η'' . Na sequência foi apresentada uma compatibilização entre as soluções assintóticas e as soluções numéricas para os escoamentos e grandezas reológicas aqui descritas. As soluções numéricas foram obtidas com o desenvolvimento de um código numérico em FORTRAN baseando-se no algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem, adaptado para os escoamentos aqui tratados. O passo de tempo de integração foi utilizado de forma compatível com os parâmetros físicos afim de se bem recuperar as propriedades reológicas. Ademais foi feita uma análise da convergência dos dados numéricos baseando-se no tempo adimensional numérico $\tilde{t} = t/\tau_p$ onde constatou-se que para $\tilde{t} > 4$ estes dados já convergiam com erro numérico inferior a 10^{-5} .

Para o cisalhamento simples foi constatado para o regime de pequenas deformações ($De \ll 1$) que a primeira diferença de tensões normais N_1 já possuía uma resposta não-linear com De , a saber, uma dependência quadrática. Esta dependência quadrática deixava de valer para o parâmetro De em torno de 0.25 como constatado pelo estudo do erro relativo de sucessivos valores de N_1 para vários De . Foram determinados resultados experimentais, obtidos segundo a regra de Cox-Merz, para N_1 onde a dependência quadrática também foi observada, isto é, $N_1(De) = KDe^2$, com $K = 15500$. O que se observou no experimento, no entanto, foi que esta dependência quadrática deixava de valer para uma faixa de $De \lll 1$. Portanto percebeu-se que a simulação numérica apresentada detinha a vantagem de se variar bem mais o parâmetro De (isto é, explorar regimes mais não-lineares) antes de se perder esta dependência quadrática, sendo esta inclusive uma das principais contribuições do presente

trabalho. Em seguida apresentou-se uma compatibilização entre os dados numéricos e experimentais para N_1 através da introdução de uma constante de calibração q .

Para o escoamento por cisalhamento oscilatório obtiveram-se as propriedades reológicas em função do tempo adimensional \tilde{t} , do número de Deborah e da frequência de oscilação adimensional $\tilde{\omega} = \tau\omega$. Constatou-se que através da análise dos gráficos dos diagramas de fase e dos espectros de potência da taxa de cisalhamento adimensional, $\tilde{\sigma}_{12}$, quando levava-se em conta a parte puramente viscosa e de conformação das macromoléculas, $\tilde{\sigma}_{12}$ possuía uma resposta linear com De . No entanto, quando analisada somente a parte da conformação das macromoléculas da função $\tilde{\sigma}_{12}$, viu-se que a resposta era não linear quando aumentava-se o parâmetro De . Para a primeira diferença de tensões normais \tilde{N}_1 , constatou-se que a mesma possuía uma resposta não linear com De mesmo no regime de pequenas deformações $De \ll 1$, onde viu-se, também, que N_1 é função de De^2 . Nos espectros de potência de \tilde{N}_1 e $\tilde{\sigma}_{12}^M$, notou-se que outros harmônicos de oscilação aparecem e os diagramas de fase mostraram curvas distorcidas à medida que se aumenta o parâmetro De , evidenciando assim que estas funções são as principais indicadoras de efeitos não-lineares e anisotrópicos na resposta de um fluido viscoelástico. Foi determinado ainda que a parte da conformação das macromoléculas da função $\tilde{\sigma}_{12}$, no caso geral, deixava de se compatibilizar com a parte elástica da mesma função quando no limite assintótico $De \ll 1$ para $De \approx 0.1$. Como visto na seção (6.1.2) o erro relativo entre estas duas partes possuía erro relativo maior que 1% para $De > 0.1$.

Capturou-se ainda da função \tilde{N}_1 , no cisalhamento oscilatório, no regime $De \ll 1$, as partes em fase β' e fora de fase β'' com a excitação imposta dada por $\dot{\gamma}(\tilde{t}) = De \cos(\tilde{\omega}\tilde{t})$. Onde observou-se um comportamento muito similar entre os módulos viscoelásticos β' e η' , e, β'' e η'' , respectivamente. Foi feita uma análise no sentido de se saber onde os valores da função β' diferiram-se entre si com erro relativo maior que um por cento para $\tilde{\omega} = 0.055$. Para isso variou-se De e o que constatou-se foi que para De em torno de 0.5 este erro relativo ocorreu. Arguimos, por esse motivo, que a dependência quadrática de \tilde{N}_1 por De deixava de valer para $De \approx 0.5$. Aqui vale lembrar do caso do cisalhamento simples onde esta dependência quadrática deixava de valer para $De \approx 0.25 < 0.5$. Este fato está perfeitamente em sintonia com a física dos escoamentos de cisalhamento simples e oscilatório simples, pois neste último caso as macromoléculas do fluido sofrem constantemente

uma deformação e relaxação. Por sua vez no cisalhamento simples as macromoléculas sofrem constantemente uma deformação apenas.

Ainda no cisalhamento oscilatório os módulos viscoelásticos η' e η'' foram examinados para vários valores do parâmetro De , onde para regimes viscoelásticos não-lineares ($De \geq 1$) estas funções mostraram uma dependência não só da frequência de oscilação como também do valor da taxa de cisalhamento adimensional De . Foi possível notar a presença de ambos os efeitos viscosos e elásticos devido ao grande estiramento provocado nas macromoléculas. Destaca-se que a análise feita para estes módulos tratavam-se apenas da contribuição da conformação das macromoléculas. Através da transformada de Fourier seno e cosseno determinou-se a função relaxação de tensão Φ por meio da utilização dos módulos viscoelásticos η' e η'' , para os dois casos $De \ll 1$ e $De > 1$. No caso $De = 0.1 \ll 1$, constatou-se que Φ foi bem ajustada com a utilização de apenas um elemento de Maxwell (tempo de relaxação) e nos casos $De = 2$ ou 3 , viu-se que a função relaxação de tensão já necessitava de mais um elemento de Maxwell, o que caracteriza novamente um comportamento não-linear na resposta do fluido.

Foi apresentado o algoritmo de frações continuadas, o qual mostrou-se bem eficaz para o ajuste dos módulos viscoelásticos η' , η'' , G' e G'' (obtidos na oportunidade de dados experimentais), correspondendo ao regime de viscoelasticidade linear. Indicou-se ainda que esta aplicação pode ser estendida a suspensões poliméricas mais concentradas, fluidos magnéticos entre outros com a percepção que mesmo em condição de viscoelasticidade linear esses fluidos podem apresentar respostas fora do padrão comportamental clássico de um fluido viscoelástico de Maxwell. Averiguou-se que as relações de Kramers-Kronig, princípio da causa-efeito, são uma boa ferramenta para se obter η' uma vez de posse de η'' ou vice-versa, no regime de viscoelasticidade linear.

Para o escoamento extensional permanente, viu-se que no regime elástico ($De \ll 1$) a suspensão polimérica diluída comportava-se aproximadamente como um fluido newtoniano. Verificou-se ainda neste regime que os parâmetros dominantes eram a fração volumétrica ϕ e o número de De . O parâmetro L , que mede a extensibilidade do polímero, não tinha nenhuma contribuição neste caso. No regime anisotrópico ($De \approx 1$) obteve-se uma expressão analítica para a viscosidade extensional, a qual mostrou uma dependência do tipo ϕL^3 , concordando com a mesma escala proposta por [5], na teoria de fibras rígidas delgadas.

Na parte dos escoamentos extensionais oscilatórios de um fluido viscoelástico, procedeu-se com uma análise dinâmica do comportamento do mesmo por meio de diagramas de fase e espectros de potência do sinal temporal da viscosidade extensional adimensional $\tilde{\mu}_e$. Aqui viu-se que para $De \leq 1$ teve-se uma resposta linear para $\tilde{\mu}_e$, sonda-se aqui que devido a natureza oscilatória do movimento o aparecimento dos efeitos não-lineares surgiu quando aumenta-se De para valores maiores que a unidade. Mostrou-se, portanto que aumentando-se o valor de $De > 1$ as soluções para os diagramas de fase apresentavam curvas mais complexas o que indicava uma deformação mais intensa das macromoléculas e o surgimento dos efeitos não lineares vistos no surgimento de outros modos de oscilação (nos espectros de potência) no sinal temporal de $\tilde{\mu}_e$ para $De > 1$.

Definiu-se os coeficientes em fase e fora de fase com a excitação para a viscosidade extensional para o escoamento extensional oscilatório. Neste ponto viu-se que além da dependência padrão da frequência existiu uma dependência com a amplitude (De) da taxa de deformação extensional adimensional em consequência das maiores deformações das macromoléculas presentes no escoamento, caracterizando assim regimes fortemente não-lineares. Ademais constatou-se que para valores de $De \leq 0.2$ e $\tilde{\omega} < 1$ existiu a presença de efeitos em fase com maior intensidade com relação aos efeitos fora de fase. Para $De > 0.2$ ambos os efeitos estavam presente na resposta do fluido, porém efeitos fora de fase foram vistos com maior intensidade quando comparado com o caso $De \leq 0.2$.

Foi apresentada uma nova abordagem na forma de obtenção da equação de evolução temporal do tensor conformação \mathbf{B} , onde foi utilizada a derivada material co-rotacional de Jaumann. Para a análise de propriedades reológicas da suspensão polimérica foi assumido um escoamento oscilatório de pura rotação. O sistema de EDO's que surgiu neste caso foi devidamente desacoplado utilizando-se o processo de transformação modal. Foi determinado que a tensão de cisalhamento adimensional $\tilde{\sigma}_{12}$ não possuía a parte referente a conformação das macromoléculas no regime de pequenas deformações, $De \ll 1$. Porém, a medida que aumentava-se o parâmetro De estes efeitos em $\tilde{\sigma}_{12}$ começaram a ser mais significativos, naquele momento maiores que 1% para $De > 0.35$.

Finalmente, implementou-se numericamente o escoamento capilar (no tubo) do fluido Oldroyd-B onde viu-se que para se ter desvios do perfil parabólico da velocidade foi necessário aumentar consideravelmente os valores de De e ϕ , com relação aos valores assumidos

no presente trabalho até o capítulo 6. Viu-se que para $De = 20$ e $\phi = 0.01$ o perfil da velocidade não era mais parabólico, sendo semelhantemente ao perfil de um escoamento turbulento, comum também ao perfil de velocidade de um fluido *power-law*. Foi determinado o gráfico da viscosidade intrínseca e da viscosidade na parede de uma suspensão polimérica a $\phi = 0.01$ onde notou-se que foi necessário aumentar substancialmente o valor de De para se obter o efeito pseudoplástico destas viscosidades.

8.2 Possíveis trabalhos futuros

Como continuidade da presente tese sugere-se explorar, com o auxílio da teoria aqui desenvolvida, a análise de Fourier dos coeficientes viscoelásticos para frequências múltiplas da fundamental de excitação. Investigar esses coeficientes em regimes semi-diluídos (em torno de $\phi = 10\%$) para capturar a influência das interações hidrodinâmicas de macromoléculas na resposta não-linear do fluido para os diferentes escoamentos cisalhantes estudados. O foco aqui seria examinar a interação hidrodinâmica entre macromoléculas para diferentes números de Deborah e frações volumétricas. Realizar simulações numéricas usando o modelo de fluidos elásticos de duas equações investigados na presente tese no estudo de escoamento não isotérmicos em tubo com dependência da viscosidade tanto da fração volumétrica ϕ quanto da temperatura T . Neste caso a equação da energia em condições de incompressibilidade é necessária para o fechamento do problema.

Investigar a redução de arrasto de escoamento turbulento em tubos usando o modelo de duas equações para polímero de alto peso molecular diluído. Nesta etapa recomenda-se o uso de simulações do tipo direta (*Direct Numerical Simulation-DNS*) do escoamento turbulento com aditivos sendo macromoléculas. Uma questão importante é investigar a importância relativa da elasticidade (relaxação) do polímero e anisotropias na linha dos dois regimes averiguados nesta tese para o escoamento extensional permanente.

Realizar experimentos de caracterização reológica em regimes de escoamentos (cisalhantes permanentes e transientes) em maiores números de Deborah para determinação da primeira diferença de tensões normais N_1 além da dependência quadrática de De . Estes resultados seriam da maior relevância para validação dos cálculos apresentados na tese em condição fortemente não-linear de N_1 .

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Absi, F.S., *Modelagem Microestrutural de Líquidos Elásticos em Escoamentos*. Dissertação de Mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, 2006.
- [2] Absi, F.S., Oliveira, T.F., Cunha, F.R., *A note on the extensional viscosity of elastic liquids under strong flows*, Journal Fluid Mechanics. 33, 401-414, 2006.
- [3] Aris, R., *Vector, Tensor and Basic Equation of Fluids Mechanics*. Dover Books on Mathematics, New York, 1962.
- [4] Barnes, H. A., Hutton, J. F., Walters, K., *An introduction to rheology*. [S.l.]: Elsevier, 1989. v. 3.
- [5] Batchelor, G.K., *Slender-Body theory for particle of arbitrary cross section in stokes flow*, J. Fluid Mechanics, 44, 419. 1970
- [6] Batchelor, G.K., *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, New York,USA, 2006.
- [7] Batchelor, G. K., Green, J., *The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field*. Journal of Fluid Mechanics, Cambridge Univ Press, v. 56, n. 02, p. 375-400, 1972.

- [8] Bird, R.B., Armstrong, R.C., Hassager, O., *Dynamics of Polymeric Liquids*, vol.1. Second Edition, John Wiley and Sons, Inc., New York, USA, 1987.
- [9] Bland, D.R., *The theory of linear viscoelasticity*. RR Donnelley, Mineola-New York, Dover publication, 2016.
- [10] Bretas, R. E. S., Davila, M. A., *Reologia de Polímeros Fundidos*. 2nd. ed. [S.l.]: Ed. São Carlos: EDUFSCar, 2005.
- [11] Brown, R., *A brief account of the microscopical observations made in the months of june and july of 1827, on the particles contained in the pollen of plants and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies*. Edinburgh new philosophical journal (pp. 358-371, July-September, 1828).
- [12] Callister JR., W.D., *Materials Science and Engineering: an Introduction*, Third Edition, John Wiley e Sons, Inc, New York, 1994.
- [13] Canevarolo, S.V., *Ciência dos Polímeros: Um Texto Básico para Tecnólogos e Engenheiros*, Artliber Editora, São Paulo, 2002.
- [14] Carreau, P., *Tese (Doutorado)-University of Wisconsin*, Madison, 1968.
- [15] Chilcott, M. D., Rallison, J. M., *Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, v. 29, p. 381-432. ISSN 0377-0257, 1988.
- [16] Cichocki, B., Felderhof, B. U., *Slow dynamics of linear relaxation systems*. Physica A 211, 165-192, 1994.
- [17] Cox, W., Merz, E., *Rheology of polymer melts a correlation of dynamic and steady flow measurements*. In: ASTM INTERNATIONAL. International Symposium on Plastics Testing and Standardization. [S.l.], 1959.
- [18] Cunha, F. R., Andreotti, M., *A study of the effect of polymer solution in promoting friction reduction in turbulent channel flow*. Journal of fluids engineering, American Society of Mechanical Engineers, v. 129, n. 4, p. 491-505, 2007.

- [19] Cunha, F.R., Rosa, A.P., Dias, N.J., *Rheology of a very dilute magnetic suspension with micro-structures of nanoparticles*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2016.
- [20] Cunha, F.R., *Roteiro Experimental: Fluidos não-newtonianos em cisalhamento permanente e transiente*. Material utilizado na disciplina de Dinâmica dos fluidos não-newtonianos. ENM/FT/UnB, 2015/2.
- [21] Cunha, F.R., *Notas de aula do curso de Dinâmica dos fluidos não-Newtonianos*. Programa de pós-graduação em Ciências Mecânicas. ENM/FT/UnB, 2015-2.
- [22] Dealy, J.M., *Official nomenclature for material functions describing the response of a viscoelastic fluid to various shearing and extensional deformations*. J. Rheol., 28, 181-195, 1984.
- [23] Dias, N.J., *Caraterização reologica de fluidos complexos em cisalhamento linear e tubo capilar*. Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, 2014.
- [24] Einstein, A., *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. New York: Dover Publications, 1956.
- [25] Einstein, A., *On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat*. Ann. d. Phys, v. 17, p. 549-560, 1905.
- [26] Fernandez, P. J., *Introdução à teoria das probabilidades*. IMPA, Publicações Matemáticas, 2005.
- [27] Flory, P.J., *Statistical Mechanics of Chain Molecules*. Wiley, New York, 1969.
- [28] Gennes, P.G., *Introduction to polymer dynamics*. Cambridge University Press, 1990.
- [29] Giesekus, H., *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **11**, 69-109, (1982); **12**, 367-374 (1983); *Rheology Acta*, **21**, 366-375 (1982).
- [30] Grmela, M., Carreau P.J., *Conformation tensor rheological models*. J. of Non-Newtonian Fluid Mechanics, vol. 23, 271-294, 1986.

- [31] Guénette, R., Zine, A., Fortin, A., Carreau, P., Grmela, M., *Simulation of viscoelastic flows using a conformation tensor model*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, vol.45, 187-208, 1992.
- [32] Gupta, R. K., Nguyen, D. A., Sridhar, T., *Extensional viscosity of dilute polystyrene solutions: effect of concentration and molecular weight*. Physics of Fluids, vol. 12, 6, 2000.
- [33] Guyon, E., Hulin, J.P., Petit, L., Mitescu, C. D., *Physical Hydrodynamics*. Oxford University Press, New York-USA, 2015. Second Edition.
- [34] Herrchen, M., Ottinger H. C., *A detailed comparison of various FENE dumbbell models*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 68, 17-42. 1997.
- [35] Hinch, E.J, *Mechanical models of dilute polymer solutions in strong in strong flows*. Phys. Fluids 20,22. 1977
- [36] Hinch, E.J, *Uncoiling a polymer molecule in a strong extensional flow*. J. Non-Newtonian Fluid Mech. 54, 209. 1994.
- [37] https://en.wikipedia.org/wiki/Continued_fraction
- [38] Iserles, A., *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equation*. Cambridge University Press, Second Edition, 2009.
- [39] James, F. D., Sridhar, T., *Molecular conformation during steady-state measurements of extensional viscosity*. Journal of Rheology, 39, 713-724, 1995.
- [40] Kennedy, P., *Flow Analysis of Injection Molds*. Munich: Hanser Gardner Publications, 1995. ISBN 1569901813.
- [41] Larson, R. G., *Constitutive equations for polymer melts and solutions*. Department of Polymer Engineering, The University of Akron, Akron, OH 44325: Butterworths, 364 p. Boston, 1988.
- [42] Langevin, P., *Sur la théorie du mouvement brownien [On the Theory of Brownian Motion]*. C. R. Acad. Sci. Paris. 146: 530-533.; reviewed by D. S. Lemons & A.

- Gythiel: Paul Langevin's 1908 paper "On the Theory of Brownian Motion" [...], Am. J. Phys. 65, 1079 (1997), doi: 10.1119/1.18725, 1908.
- [43] Lielens, G., Keunings, R., Legat, V., *The fene-l and fene-ls closure approximations to the kinetic theory of finitely extensible dumbbells*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, v. 87, n. 2-3, p. 179-196, 1999. ISSN 0377-0257.
- [44] Mackay, M. E., Petrie, C. J. S., *Estimates of apparent elongational viscosity using the fibre spinning and pure methods. Calculations for FENE-P dumbbell model and comparison with published data*, Rheol. Acta 28, 281-293, 1989.
- [45] Macosko, C., *Rheology: Principles, Measurements and Applications*. [S.l.]: VHC, 1994.
- [46] Malvern, L. E., *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliff's, New Jersey, 1969.
- [47] Mano, E.B., *Polímeros Como Materiais de Engenharia*, Editora Edgard Blucher Ltda, São Paulo, 1991.
- [48] McQueire, D. A., *Statistical Mechanics*. University Science Books. University of California, Davis, ISBN 1-891389-15-7, 2000.
- [49] Oldroyd, J., *Non-newtonian flow of liquids and solids. Rheology: theory and applications*, New York: Academic, v. 1, p. 653-682, 1956.
- [50] Oliveira, T.F., Cunha, F.R., *A theoretical description of a dilute emulsion of very viscous drops undergoing unsteady simple shear*. Journal of Fluids Engineering, vol.133, 2011.
- [51] Pereira, I.D.O., *Reologia de Líquidos Viscoelásticos e Termossensíveis em Cisalhamento*. Projeto final de graduação, Faculdade de Tecnologia, Departamento de Engenharia Mecânica-UnB, 2017/1.
- [52] Rivlin, R. S., Ericksen J. L., *Stress-deformation relation for isotropic materials*, J. Rational. Mech. Analysis 4, 323-425, 1955.

- [53] Rosa, A. P., *Análise Numérica e Experimental da Reologia e Microestrutura de Suspensões Magnéticas*. Dissertação de Mestrado em Ciências Mecânicas. Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília-DF, 2014.
- [54] Saad, A. K., Joseph, R. R., Srinivasa, R. R., *Rheology: Tools and Methods*. The National Academies Press, Aviation Fuels with Improved Fire Safety, 31-45, 1997.
- [55] Schleiniger, G., Weinacht, R. J., *A remark on the giesekus viscoelastic fluid*. Journal of Rheology, SOR, v. 35, n. 6, p. 1157-1170, 1991.
- [56] Schoonen, J. F. M. *Determination of Rheological Constitutive Equations using Complex Flows*. Tese (Doutorado)-Eindhoven University of Technology, 1998.
- [57] Suli, E., John, B.W., *Existence of global weak solutions to compressible isentropic finitely extensible nonlinear bead-spring chain models for dilute polymers: The two-dimensional case*. Journal of Differential Equations, vol. 261, p. 592-626, july 2016.
- [58] Tanner, R.I., *Engineering Rheology*. Pergamon, Oxford, 2000.
- [59] Thien, N. P., Tanner, R. I., *A new constitutive equation derived from network theory*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, vol. 2, n. 4, 353-365, 1977. ISSN 0377-0257.
- [60] Truesdell, C., Noll, W., *The non-linear field theories of mechanics*. In: *The non-linear field theories of mechanics*. [S.l.]: Springer, p. 1-579, 2004.
- [61] Verbeeten, W. M. H., Peters, G. W. M., Baaijens, F. P. T., *Differential constitutive equations for polymer melts: The extended pom-pom model*. Journal of Rheology, SOR, v. 45, n. 4, p. 823-843, 2001.
- [62] Warner, H.R., *Kinetic theory and rheology of dilute suspension of finitely extendible dumbbells*. Ind. Eng. Chem. Fundam. 11,379. 1972.
- [63] Wapperom, P., Hulsen, M. A., *A lower bound for the invariants of the configuration tensor for some well-known differential models*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, v. 60, n. 2-3, p. 349 -355, ISSN 0377-0257, 1995.

- [64] Yasuda, K., *Tese (Doutorado)-Massachusetts Institute of Technology*, Cambridge, 1979.
- [65] Yasuda, K., Armsrong, R., Cohen, R., *Shear flow properties of concentrated solutions of linear and star branched polystyrenes*. *Rheologica Acta*, Springer, v. 20, n. 2, p. 163-178, 1981.
- [66] Yu, P., Du, Q., Liu, C., *FENE Dumbbell Model and its Several Linear and Nonlinear Closure Approximations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, vol. 4, number 3, pp. 709-731, 2005.
- [67] Zhou, Q., Akhavan, R. A., *Comparison of fene and fene-p dumbbell and chain models in turbulent flow*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 109, n. 2-3, p.115-155, ISSN 0377-0257, 2003.

APÊNDICES

I. PROPRIEDADES VETORIAIS

Considere as bases $\Omega = \{\hat{\mathbf{e}}_i\}$, que é a base canônica do espaço vetorial \mathbb{R}^3 e $\Psi = \{\mathbf{b}_i\}$ uma base ortogonal qualquer do mesmo espaço vetorial. Aqui $i \in \{1, 2, 3\}$. Queremos expressar o vetor $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$ em termos da base Ψ .

Como Ψ é base, então é formada por vetores linearmente independentes (L.I.) e a mesma gera todo o espaço \mathbb{R}^3 . Então

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 \alpha^i \mathbf{b}_i, \quad (\text{I.1})$$

em que α^i são as coordenadas dos vetores \mathbf{a} na base Ψ . Podemos ainda escrever, numa outra notação, como: $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \mathbf{b}^i$.

Escrevendo a base Ψ na base Ω , temos, para cada $i = 1, 2, 3$ a equação

$$\mathbf{b}_i = \sum_{j=1}^3 b_{ij} \hat{\mathbf{e}}_j. \quad (\text{I.2})$$

Substituindo a equação (I.2) na equação (I.1) teremos:

$$\mathbf{a} = \left(\sum_{i=1}^3 \alpha^i b_{i1} \right) \hat{\mathbf{e}}_1 + \left(\sum_{i=1}^3 \alpha^i b_{i2} \right) \hat{\mathbf{e}}_2 + \left(\sum_{i=1}^3 \alpha^i b_{i3} \right) \hat{\mathbf{e}}_3. \quad (\text{I.3})$$

Mas temos ainda que o vetor \mathbf{a} pode ser escrito de forma canônica como $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 a_i \hat{\mathbf{e}}_i$. Desse modo comparando estas duas últimas expressões temos o seguinte sistema nas variáveis α^i .

$$\begin{cases} a_1 = \alpha^1 b_{11} + \alpha^2 b_{21} + \alpha^3 b_{31}, \\ a_2 = \alpha^1 b_{12} + \alpha^2 b_{22} + \alpha^3 b_{32}, \\ a_3 = \alpha^1 b_{13} + \alpha^2 b_{23} + \alpha^3 b_{33}. \end{cases} \quad (\text{I.4})$$

Usando a regra de Cramer e a notação do produto misto entre vetores do \mathbb{R}^3 temos que a solução para α^1 será

$$\alpha^1 = \frac{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}. \quad (\text{I.5})$$

Vamos definir $\mathbf{b}^1 = \frac{\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}$, assim escrevemos $\alpha^1 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^1$. A notação \cdot representa

o produto interno usual entre os vetores, isto é, $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^3 a_i b_i$. De maneira inteiramente analógica temos que: $\alpha^2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^2$ e $\alpha^3 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^3$. Onde destacamos os vetores \mathbf{b}^2 e \mathbf{b}^3 abaixo

$$\mathbf{b}^2 = \frac{\mathbf{b}_3 \times \mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)} \text{ e } \mathbf{b}^3 = \frac{\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}. \quad (\text{I.6})$$

Desse modo ao calcularmos o produto interno entre o vetores \mathbf{b}^1 e \mathbf{b}_1 teremos:

$$\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}^1 = \mathbf{b}_1 \cdot \frac{\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)} = 1, \quad (\text{I.7})$$

note ainda que

$$\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}^2 = \mathbf{b}_1 \cdot \frac{\mathbf{b}_3 \times \mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)} = 0, \quad (\text{I.8})$$

pois $\mathbf{b}_3 \times \mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2$ e $\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2 = 0$. Em geral temos a importante relação:

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{b}^j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (\text{I.9})$$

Assim dada uma base ortogonal $\Psi = \{\mathbf{b}_i\} = \{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3\}$ do espaço vetorial \mathbb{R}^3 temos dois possíveis sistema de coordenada a saber [3]:

- Contravariante: Onde $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 \alpha^i \mathbf{b}_i$ e $\alpha^i = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^i$.
- Covariante: Onde $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \mathbf{b}^i$ e $\alpha_i = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}_i$.

I.1 Lei de transformações de Vetores e Tensores

Seja $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ pode-se escrever $\mathbf{u} = \sum_{i=1}^3 u_i \hat{\mathbf{e}}_i$, isto é, na base canônica $\{\hat{\mathbf{e}}_i\}$. Neste momento aplica-se uma rotação de corpo rígido através da transformação linear (tensor) \mathbf{Q} a fim de que agora nosso vetor \mathbf{u} seja escrito da forma:

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^3 u'_i \hat{\mathbf{e}}'_i, \quad (\text{I.10})$$

em que $\{\hat{\mathbf{e}}'_i\}$ representa o novo sistema de coordenadas. É comum usar a notação: $\mathbf{Q} = [Q_{ij}] = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j$, na qual Q_{ij} é a entrada na linha i e coluna j do tensor $\mathbf{Q} = [Q_{ij}]$.

Determinando a componente u'_i do vetor \mathbf{u} no sistema de coordenada $\{\hat{\mathbf{e}}'_i\}$ teremos:

$$u'_i = \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{e}}'_i = \left(\sum_{p=1}^3 u_p \hat{\mathbf{e}}_p \right) \cdot \hat{\mathbf{e}}'_i = \sum_{p=1}^3 u_p (\hat{\mathbf{e}}'_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_p). \quad (\text{I.11})$$

Vamos definir: $Q_{ip} = \hat{\mathbf{e}}'_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_p$ e assim $u'_i = Q_{ip} u_p$. Note que podemos ainda concluir com esta definição a relação:

$$Q_{ip} = \hat{\mathbf{e}}'_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_p = \|\hat{\mathbf{e}}'_i\| \|\hat{\mathbf{e}}_p\| \cos(\hat{\mathbf{e}}'_i, \hat{\mathbf{e}}_p) = \cos(\hat{\mathbf{e}}'_i, \hat{\mathbf{e}}_p). \quad (\text{I.12})$$

Diante do que foi exposto até agora, vejamos como fica o produto dos tensores \mathbf{Q} e \mathbf{Q}^T .

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = [Q_{ij}] = \sum_{p=1}^3 Q_{ip} Q_{jp} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = \sum_{p=1}^3 [\cos(\hat{\mathbf{e}}'_i, \hat{\mathbf{e}}_p) \cos(\hat{\mathbf{e}}'_j, \hat{\mathbf{e}}_p)] \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j. \quad (\text{I.13})$$

Analisando apenas o termo $\cos(\hat{\mathbf{e}}'_i, \hat{\mathbf{e}}_p) \cos(\hat{\mathbf{e}}'_j, \hat{\mathbf{e}}_p)$, podemos que

$$\cos(\hat{\mathbf{e}}'_i, \hat{\mathbf{e}}_p) \cos(\hat{\mathbf{e}}'_j, \hat{\mathbf{e}}_p) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (\text{I.14})$$

Finalmente conclui-se que $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$, em que \mathbf{I} é o tensor identidade. Assim dizemos que \mathbf{Q} é um tensor ortogonal, e concluimos, desta última equação, que $\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^{-1}$, isto é, a transposta do tensor é igual a inversa do próprio tensor. A título de simplificação usaremos apenas a notação:

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \sum_{p=1}^3 Q_{ip} Q_{jp} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = Q_{ip} Q_{jp} = \delta_{ij}. \quad (\text{I.15})$$

Definição I.1 Um ente $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ é chamado de vetor se, e somente se, obdece a lei de transformação

$$u'_i = Q_{ik} u_k. \quad (\text{I.16})$$

Neste caso dizemos que \mathbf{u} é uma quantidade objetiva, ou seja, é invariante em relação à uma transformação ortogonal ou rotação de corpo rígido.

Para tensores de segunda ordem temos uma definição análoga, vejamos:

Definição I.2 Um tensor cartesiano de segunda ordem \mathbf{T} é uma quantidade que pode ser representada no espaço vetorial das matrizes reais 3×3 . Assim, usamos a notação:

$$\mathbf{T} = \sum_{i,j=1}^3 T_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = [T_{ij}]. \quad (\text{I.17})$$

E que obdece às seguintes relações:

- $T'_{ij} = \sum_{p,q=1}^3 Q_{ip}Q_{jq}T_{pq}$; ou simplesmente $T_{ij} = Q_{ip}Q_{jq}T_{pq} \Leftrightarrow \mathbf{T}' = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T$.
- $T_{ij} = \sum_{p,q=1}^3 Q_{pi}Q_{qj}T'_{pq}$, ou simplesmente $T_{ij} = Q_{pi}Q_{qj}T'_{pq} \Leftrightarrow \mathbf{T} = \mathbf{Q}^T\mathbf{T}'\mathbf{Q}$.

Desta forma dizemos que o tensor \mathbf{T} é uma quantidade objetiva se satisfaz estas relações.

Com estas definições (I.1) e (I.2) podemos concluir propriedades interessantes sobre vetores e tensores, das quais destacamos duas, a saber, (1) a invariância do produto interno entre vetores que sofreram uma rotação de corpo rígido e (2) a invariância do traço de um tensor. Vejamos:

Temos que o produto interno entre os vetores $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ e $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3) \in \mathbb{R}^3$ é dado por: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^3 a_i b_i = a_i b_i$. Assim no novo sistema de coordenada temos que

$$\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b}' = \sum_{i=1}^3 a'_i b'_i = a'_i b'_i = (Q_{ip}a_p)(Q_{iq}b_q) = (Q_{ip}Q_{iq})a_p b_q. \quad (\text{I.18})$$

A penúltima igualdade se deu pela definição (I.1) e pela notação dada em (I.15). Continuando nossa análise, temos que:

$$\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b}' = (Q_{ip}Q_{iq})a_p b_q = \delta_{pq} a_p b_q = a_p b_p = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}. \quad (\text{I.19})$$

Vejamos agora como fica o traço de um tensor qualquer. Seja o tensor $\mathbf{T} = [T_{ij}]$, se queremos o traço de \mathbf{T} fazamos $i = j$ e escrevemos $tr(\mathbf{T}) = T_{ii} = \sum_{i=1}^3 T_{ii}$. Agora de acordo com a definição (I.2) temos que $T'_{ij} = Q_{ip}Q_{jq}T_{pq}$, e novamente se queremos o traço do tensor \mathbf{T}' referente ao novo sistema de coordenada $\{\hat{\mathbf{e}}'_i\}$, fazamos $i = j$, assim:

$$tr(\mathbf{T}') = \sum_{i=1}^3 T'_{ii} = T'_{ii} = Q_{ip}Q_{iq}T_{pq} = \delta_{pq}T_{pq} = T_{pp} = tr(\mathbf{T}). \quad (\text{I.20})$$

Chamaremos o traço de \mathbf{T} como sendo o primeiro invariante do tensor, e usaremos a notação:

$$I_{\mathbf{T}} = tr(\mathbf{T}). \quad (\text{I.21})$$

Estes são apenas dois exemplos de invariância, do produto interno entre vetores e do traço de um tensor. Na verdade até o determinante de um tensor permanece invariante

após uma rotação de corpo rígido. Pois, podemos provar que o determinante de um tensor \mathbf{T} , (notação: $\det(\mathbf{T})$) é dado pela relação:

$$\det(\mathbf{T}) = \frac{1}{6} [(tr(\mathbf{T}))^3 + 2 tr(\mathbf{T}^3) - 3 (tr(\mathbf{T}^2)) tr(\mathbf{T})], \quad (\text{I.22})$$

e como o traço é invariante então o determinante também o é. Chamaremos o determinante de um tensor como sendo seu terceiro invariante e usaremos a notação

$$III_{\mathbf{T}} = \det(\mathbf{T}). \quad (\text{I.23})$$

O segundo invariante de um tensor é por definição a expressão

$$II_{\mathbf{T}} = \frac{1}{2} [(tr(\mathbf{T}))^2 - tr(\mathbf{T}^2)]. \quad (\text{I.24})$$

I.2 Polinômio Característico e o Teorema de Cayley-Hamilton

O polinômio característico de um tensor \mathbf{T} é por definição dado por

$$p(\lambda) = \det(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{I}). \quad (\text{I.25})$$

Se estamos interessados em encontrar as direções e amplitudes principais do tensor \mathbf{T} resolvemos a equação $p(\lambda) = 0$. Note que resolver esta equação é o mesmo que resolver o sistema $\mathbf{T} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$. O vetor \mathbf{v} é chamado de autovetor de \mathbf{T} e o número (real ou complexo) λ é chamado de autovalor. Se \mathbf{T} é um tensor de segunda ordem podemos escrever seu polinômio característico na forma,

$$p(\lambda) = \det(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{I}) = -\lambda^3 + I_{\mathbf{T}} \lambda^2 - II_{\mathbf{T}} \lambda + III_{\mathbf{T}}. \quad (\text{I.26})$$

Sabemos que quando escrevemos o tensor de segunda ordem \mathbf{T} na sua base de autovetores $\{\mathbf{v}_i\} = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$, com seus respectivos autovalores $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$, a matriz \mathbf{T} possui a forma:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.27})$$

E como cada um dos autovalores $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$, satisfaz a equação (I.26), então temos o sistema:

$$\begin{cases} \lambda_1^3 - I_{\mathbf{T}}\lambda_1^2 + II_{\mathbf{T}}\lambda_1 - III_{\mathbf{T}} = 0, \\ \lambda_2^3 - I_{\mathbf{T}}\lambda_2^2 + II_{\mathbf{T}}\lambda_2 - III_{\mathbf{T}} = 0, \\ \lambda_3^3 - I_{\mathbf{T}}\lambda_3^2 + II_{\mathbf{T}}\lambda_3 - III_{\mathbf{T}} = 0. \end{cases} \quad (\text{I.28})$$

Este sistema pode ser escrito na forma polinomial do tipo:

$$\begin{pmatrix} \lambda_1^3 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^3 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^3 \end{pmatrix} - I_{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} \lambda_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^2 \end{pmatrix} + II_{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} + III_{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.29})$$

Se levarmos em conta que o tensor \mathbf{T} está escrito na base de autovetores então a equação (I.29) pode ser ainda escrita na forma equivalente,

$$\mathbf{T}^3 - I_{\mathbf{T}}\mathbf{T}^2 + II_{\mathbf{T}}\mathbf{T} + III_{\mathbf{T}}\mathbf{I} = \mathbf{0} \quad (\text{I.30})$$

Note que esta equação (I.30) é equivalente a fazer $p(\mathbf{T})$ na equação (I.26), e como o resultado final da equação (I.30) foi nulo temos que o tensor \mathbf{T} satisfaz seu próprio polinômio característico. Este importante resultado é o chamado teorema de Cayley-Hamilton.

O objetivo agora é provar que qualquer tensor de segunda ordem \mathbf{A} (escrito na base de autovetores ou não) satisfaz seu polinômio característico. Para isto vamos precisar da definição de tensor adjunto, vejamos:

Definição I.3 *Seja a_{ij} as componentes do tensor \mathbf{A} , isto é, $\mathbf{A} = \sum_{i,j=1}^3 a_{ij}\hat{\mathbf{e}}_i\hat{\mathbf{e}}_j$, defini-se*

$$a_{ij}^* = \frac{1}{2}\mathcal{E}_{ipq}\mathcal{E}_{jrs}a_{pr}a_{qs}, \quad (\text{I.31})$$

com $p, q, r, s \in \{1, 2, 3\}$, como sendo as componentes do tensor cofator de \mathbf{A} , denotado por \mathbf{A}^ . E o tensor transposto de \mathbf{A}^* , denotado por \mathbf{A}^{*T} , é chamado de tensor adjunto de \mathbf{A} .*

Na definição (I.3) acima temos o símbolo \mathcal{E}_{ipq} . Este representa o permutador de Levi-Cevita, que é definido por:

$$\mathcal{E}_{ipq} = \begin{cases} 1, & \text{se } ipq = 123, pqi = 231, qip = 312, \\ -1, & \text{se } iqp = 132, qpi = 321, piq = 213, \\ 0, & \text{se } i = p \text{ ou } p = q \text{ ou } i = q. \end{cases} \quad (\text{I.32})$$

As principais propriedades do tensor adjunto são de fáceis demonstrações e são apresentadas no teorema a seguir

Teorema I.4 *Sejam \mathbf{A} um tensor de segunda ordem e \mathbf{A}^* seu adjunto, então temos que*

1. $\mathbf{A}\mathbf{A}^{*T} = \mathbf{A}^{*T}\mathbf{A} = \det(\mathbf{A})\mathbf{I}$;
2. Se $\det(\mathbf{A}) \neq 0$ então $\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})}\mathbf{A}^{*T}$.
3. Para quaisquer dois vetores \mathbf{a} e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$ temos que: $\mathbf{A}^*(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{A}^*\mathbf{a} \times \mathbf{A}^*\mathbf{b}$.

Apresentamos agora o caso geral do teorema de Cayley-Hamilton,

Teorema I.5 *Todo tensor de segunda ordem \mathbf{A} do espaço vetorial das matrizes reais 3×3 , satisfaz a sua própria equação característica $p(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$, isto é*

$$p(\mathbf{A}) = \mathbf{A}^3 - I_{\mathbf{A}}\mathbf{A}^2 + II_{\mathbf{A}}\mathbf{A} - III_{\mathbf{A}}\mathbf{I} = \mathbf{0}. \quad (\text{I.33})$$

Demonstração: *Considere um tensor de segunda ordem dado por $\mathbf{B} = (\mathbf{A} - \alpha\mathbf{I})$ em que $\alpha \in \mathbb{R} - \{0\}$. Chama-se \mathbf{H} o tensor adjunto de \mathbf{B} , isto é, $\mathbf{H} = \mathbf{B}^* = (\mathbf{A} - \alpha\mathbf{I})^*$. Pelo item 1 do teorema (I.4), temos que*

$$\mathbf{H}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{H} = \det(\mathbf{B})\mathbf{I} = \det(\mathbf{A} - \alpha\mathbf{I})\mathbf{I}, \quad (\text{I.34})$$

mas $p(\alpha) = \det(\mathbf{A} - \alpha\mathbf{I})$, assim

$$\mathbf{H}(\mathbf{A} - \alpha\mathbf{I}) = (-\alpha^3 + I_{\mathbf{A}}\alpha^2 - II_{\mathbf{A}}\alpha + III_{\mathbf{A}})\mathbf{I}. \quad (\text{I.35})$$

Tendo em vista que este último produto envolve o fator α^3 , isto sugere propor a seguinte fatoração para o tensor \mathbf{H} :

$$\mathbf{H} = \alpha^2 + \alpha\mathbf{F} + \mathbf{G}, \quad (\text{I.36})$$

em que \mathbf{E} , \mathbf{F} e \mathbf{G} são tensores de segunda ordem a se determinar. Substituindo a equação (I.36) na equação (I.35), teremos:

$$\mathbf{H}(\mathbf{A} - \alpha\mathbf{I}) = (\alpha^2 + \alpha\mathbf{F} + \mathbf{G})(\mathbf{A} - \alpha\mathbf{I}) = -\alpha^3\mathbf{E} + \alpha^2(\mathbf{E}\mathbf{A} - \mathbf{F}) + \alpha(\mathbf{F}\mathbf{A} - \mathbf{G}) + \mathbf{G}\mathbf{A}, \quad (\text{I.37})$$

e comparando termo a termo as equações (I.37) e (I.35) obtemos o sistema:

$$\begin{cases} \mathbf{E} = \mathbf{I}, \\ \mathbf{EA} - \mathbf{F} = I_{\mathbf{A}}\mathbf{I}, \\ \mathbf{FA} - \mathbf{G} = -II_{\mathbf{A}}\mathbf{I}, \\ \mathbf{GA} = III_{\mathbf{A}}\mathbf{I}. \end{cases} \quad (\text{I.38})$$

Desse sistema concluímos que: $\mathbf{F} = (\mathbf{A} - I_{\mathbf{A}}\mathbf{I})$ e que $\mathbf{G} = (\mathbf{FA} + II_{\mathbf{A}}\mathbf{I})$. E substituindo na quarta equação do sistema (I.38) obtemos $(\mathbf{FA} + II_{\mathbf{A}}\mathbf{I})\mathbf{A} = III_{\mathbf{A}}\mathbf{I}$ e $\mathbf{FA}^2 + II_{\mathbf{A}}\mathbf{A} - III_{\mathbf{A}}\mathbf{I} = \mathbf{0}$.

Como $\mathbf{F} = (\mathbf{A} - I_{\mathbf{A}}\mathbf{I})$ então temos o resultado desejado que se segue nas equações

$$(\mathbf{A} - I_{\mathbf{A}}\mathbf{I})\mathbf{A}^2 + II_{\mathbf{A}}\mathbf{A} - III_{\mathbf{A}}\mathbf{I} = \mathbf{0} \quad (\text{I.39})$$

$$\mathbf{A}^3 - I_{\mathbf{A}}\mathbf{A}^2 + II_{\mathbf{A}}\mathbf{A} - III_{\mathbf{A}}\mathbf{I} = \mathbf{0} \quad (\text{I.40})$$

$$p(\mathbf{A}) = \mathbf{0}. \quad (\text{I.41})$$

□

I.3 Decomposição Polar de um Tensor

A decomposição polar de um tensor possui aplicação no estudo de deformação e cinemática de um contínuo nas descrições Euleriana (\mathbf{x}) e Lagrangiana (\mathbf{X}). Ao se usar esta decomposição fica mais claro nas equações que descrevem o movimento a parte associada a rotação de corpo rígido e a parte associada ao estiramento (stretch) do corpo. Nesta seção usaremos a notação $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$ para denotar o produto interno usual entre dois vetores \mathbf{u} e $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$. Iniciemos com a definição

Definição I.6 *Um tensor \mathbf{A} é positivo definido se para todo vetor $\mathbf{v} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^3$ tivermos $\langle \mathbf{A}\mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle > 0$.*

Um exemplo claro de tensor positivo definido é $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ o tensor identidade. Temos agora um importante teorema

Teorema I.7 *Dado qualquer tensor \mathbf{A} os tensores $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ e $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ são simétricos e se $\det(\mathbf{A}) \neq 0$, então $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ e $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ são tensores positivos definidos.*

Demonstração: A prova da simetria é imediato, pois $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^T = \mathbf{A}^T (\mathbf{A}^T)^T = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Seja $\mathbf{a} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^3$ se existe \mathbf{A}^{-1} ($\det(\mathbf{A}) \neq 0$) então afirmamos que $\mathbf{A}\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$. De fato pois se fosse $\mathbf{A}\mathbf{a} = \mathbf{0}$ então $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{a} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{a} = \mathbf{0}$. O que contradiz a hipótese de ser $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$. Do mesmo modo temos que $\mathbf{A}^T \mathbf{a} \neq \mathbf{0}$. Calculemos, ainda para $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$, o produto interno

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{a} \rangle = \langle (\mathbf{A}^T)^T \mathbf{a}, \mathbf{A}\mathbf{a} \rangle = \langle \mathbf{A}\mathbf{a}, \mathbf{A}\mathbf{a} \rangle = \|\mathbf{A}\mathbf{a}\|^2 > 0, \quad (\text{I.42})$$

pois $\mathbf{A}\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$.

Apresentamos agora o teorema da decomposição polar

Teorema I.8 *Todo tensor \mathbf{A} inversível pode ser representado na forma $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{U}$ (decomposição polar à esquerda) ou da forma $\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{Q}$, (decomposição polar à direita) em que \mathbf{Q} é um tensor ortogonal, isto é, $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T$. E os tensores \mathbf{U} e \mathbf{V} são simétricos positivos definidos, com $\mathbf{U}^2 = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ e $\mathbf{V}^2 = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$. E ainda temos que esta decomposição é única.*

Demonstração: Vamos assumir que $\mathbf{U} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ e que $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{U}$ assim temos que \mathbf{U} é simétrico positivo definido pelo teorema anterior e escrevemos $\mathbf{Q} = \mathbf{A}\mathbf{U}^{-1}$ (é claro que \mathbf{U} possui inversa pois por hipótese $\det(\mathbf{A}) \neq 0$.) O passo seguinte agora é mostrar que \mathbf{Q} é ortogonal, sigamos:

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = (\mathbf{A}\mathbf{U}^{-1})^T (\mathbf{A}\mathbf{U}^{-1}), \quad (\text{I.43})$$

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = (\mathbf{U}^{-1})^T (\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \mathbf{U}^{-1}. \quad (\text{I.44})$$

Como \mathbf{U} é simétrico então \mathbf{U}^{-1} também o é, $\mathbf{U}^{-1} = (\mathbf{U}^{-1})^T$, assim

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{U}^{-1}. \quad (\text{I.45})$$

Agora se assumirmos, finalmente, que $\mathbf{U}^2 = \mathbf{U}\mathbf{U} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$, então teremos que $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$, e \mathbf{Q} é desta forma um tensor ortogonal. A prova para a decomposição polar à direita é feita de forma análoga e fica a cargo do leitor.

I.4 Produto Diádico

Sejam \mathbf{u} e \mathbf{v} dois vetores em \mathbb{R}^3 . O produto diádico de \mathbf{u} por \mathbf{v} , denotado por $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$, é a matriz três por três dada por:

$$\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \mathbf{u}\mathbf{v}^T = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1v_1 & u_1v_2 & u_1v_3 \\ u_2v_1 & u_2v_2 & u_2v_3 \\ u_3v_1 & u_3v_2 & u_3v_3 \end{pmatrix} \quad (\text{I.46})$$

Este produto pode ser generalizado para quaisquer vetores $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ e $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, em que $m, n \in \mathbb{N}$. E neste caso o produto diádico $\mathbf{x} \otimes \mathbf{y}$ é uma matriz $m \times n$.

II. TENSOR DE TENSÕES E EQUAÇÕES GOVERNANTES PARA ESCOAMENTO DE UM FLUIDO

Nos escoamentos de fluidos, existem forças atuantes que provocam o movimento. Estas forças podem ocorrer devido à convecção (forças do movimento), à interação com campos externos (forças como a gravitacional ou a eletromagnética), aos gradientes de pressão e às interações entre as moléculas do fluido (forças de superfície). As forças atuando em um volume infinitesimal do meio são definidas como tensões. Assim, a tensão é definida da seguinte forma

$$\sigma_{ij} = \lim_{\delta A_i \rightarrow 0} \frac{\delta F_j}{\delta A_i}, \quad (\text{II.1})$$

em que σ_{ij} é a tensão no plano i e direção j , F_j a força na direção j e A_i a área no plano j . Usamos $i, j \in \{1, 2, 3\}$ ou $\in \{x, y, z\}$ ou ainda $\in \{r, \theta, z\}$.

O tensor de tensões é então uma entidade matemática que possui nove graus de liberdade e desta maneira sua melhor representação é na forma de matriz, como abaixo:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{rr} & \sigma_{r\theta} & \sigma_{rz} \\ \sigma_{\theta r} & \sigma_{\theta\theta} & \sigma_{\theta z} \\ \sigma_{zr} & \sigma_{z\theta} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.2})$$

A última matriz apresentada na equação (II.2), é referente ao sistema de coordenadas cilíndricas, na qual:

$$\begin{cases} x(r, \theta, z) = r \cos(\theta), \\ y(r, \theta, z) = r \sin(\theta), \\ z(r, \theta, z) = z. \end{cases} \quad (\text{II.3})$$

A figura (II.1) mostra este tensor de forma geométrica em que se vê suas componentes escalares, em coordenadas retangulares. Nesta figura as componentes observadas que apresentam índices iguais são chamadas de tensões normais, sendo as de índice diferentes chamadas de tensões cisalhantes. Às vezes pode ocorrer que o tensor de tensões tenha

uma natureza simétrica, isto é, $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, logo, bastam apenas seis componentes para se determinar o tensor.

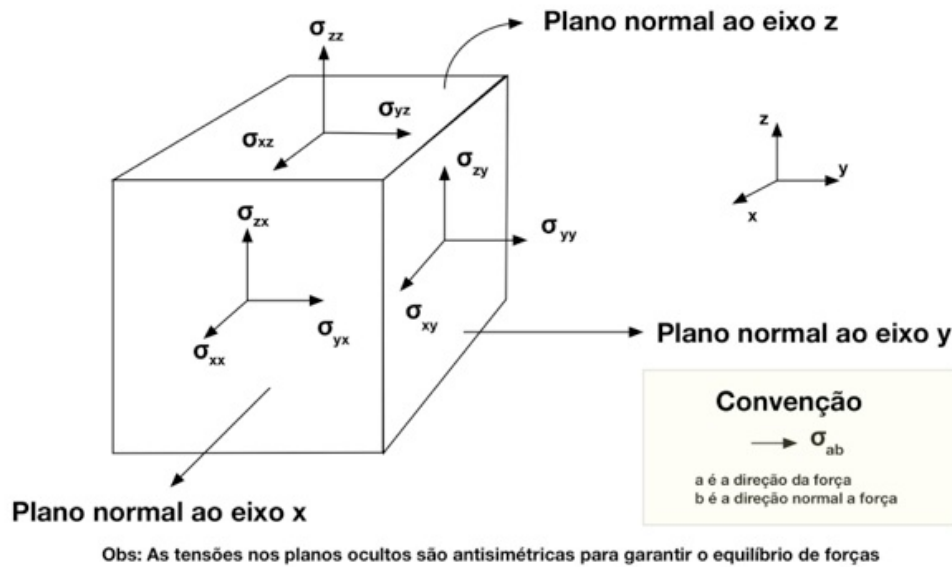


Figura II.1: Componentes do tensor de tensões σ em coordenadas retangulares.

As equações que regem o escoamento de fluidos são formadas pela equação da conservação de massa (ou equação da continuidade), pela equação da conservação da quantidade de movimento, pela equação da energia e pela equação da quantidade de movimento angular. Mas, em geral, considera-se apenas as equações de conservação de massa e quantidade de movimento, também chamda de equação de Cauchy. Apresentamos abaixo estas duas equações.

Consideremos um corpo material Ω e neste corpo imagine uma porção infinitesimal $\delta\Omega$ que possui volume δV e massa δm_c . A massa específica, ρ , deste corpo Ω pode ser definida como:

$$\rho = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta m_c}{\delta V}. \quad (\text{II.4})$$

Supondo que existe uma distribuição de massa contínua e uniforme no corpo, podemos calcular a massa total de Ω como sendo

$$m_\Omega = \int_V \rho dV. \quad (\text{II.5})$$

Seja ψ uma propriedade (escalar, vetorial ou tensorial) qualquer do fluido. Pelo princípio da conservação que declara que os efeitos líquidos de qualquer propriedade ψ são nulos, temos, por exemplo, a equação da conservação da massa

$$\frac{Dm_\Omega}{Dt} = 0, \quad (\text{II.6})$$

em que $\frac{D}{Dt}$ denota a derivada material que é definida como

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\psi, \quad (\text{II.7})$$

e \mathbf{u} representa o campo de velocidade e ∇ o operador gradiente.

Considera-se a equação (II.5) e nela aplica-se o Teorema do Transporte de Reynolds e obtém-se:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = \int_V \frac{\partial\rho}{\partial t} dV + \int_S \rho \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = 0, \quad (\text{II.8})$$

aqui S denota a superfície do volume δV e $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor normal unitário que aponta para fora desta superfície. Agora aplicando o teorema da divergência na equação (II.8) pode-se passar toda a integração para o volume V , ficando:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = \int_V \left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) dV = 0. \quad (\text{II.9})$$

Aplicando, agora, o teorema da localização temos finalmente a equação da conservação de massa ou equação da continuidade:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (\text{II.10})$$

Podemos reescrever esta última equação como sendo

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla\rho = 0 \iff \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (\text{II.11})$$

Descreveremos agora a equação da quantidade de movimento, também conhecida como equação de Cauchy. Para isto considere a definição da quantidade de movimento linear, \mathbf{q} , no corpo Ω dada pela equação:

$$\mathbf{q} = \int_V \rho \mathbf{u} dV. \quad (\text{II.12})$$

Pelo mesmo princípio que originou a equação (II.5), podemos escrever:

$$\frac{D\mathbf{q}}{Dt} = \mathbf{f} \iff \frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV - \mathbf{f} = \mathbf{0}. \quad (\text{II.13})$$

Perceba que o lado esquerdo da equação (II.13) representa a segunda lei de Newton, isto é, somatório das forças iguais a zero. Aqui o vetor força, \mathbf{f} , denota uma força de equilíbrio. De acordo com as teorias do meio contínuo estas forças são de origens de campo (forças que envolvem volume, de origem macroscópica, por exemplo a força gravitacional) mais forças de superfície (que possuem origem microscópica associada ao movimento aleatório das moléculas ou partículas do corpo material). Desse modo podemos escrever \mathbf{f} como sendo:

$$\mathbf{f} = \int_V \rho \mathbf{b} dV + \int_S \mathbf{T}^{(\mathbf{n})} dS, \quad (\text{II.14})$$

em que o vetor \mathbf{b} denota uma força por unidade de massa ou forças de campo e $\mathbf{T}^{(\mathbf{n})}$ é o vetor tensão.

O Teorema de Cauchy afirma que o vetor de tensões ou “traction”, $\mathbf{T}^{(\mathbf{n})}$, referente a qualquer superfície (ou plano) cujo diretor é o vetor \mathbf{n} pode ser escrito como uma combinação linear dos vetores mutuamente ortogonais referente à base $\{\mathbf{e}_i\}$ do espaço vetorial \mathbb{R}^3 . Deste modo pode-se escrever o vetor $\mathbf{T}^{(\mathbf{n})}$ como sendo

$$\mathbf{T}^{(\mathbf{n})} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{n},$$

em que $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões e T denota seu transposto. A figura (II.2) mostra uma representação esquemática desta situação.

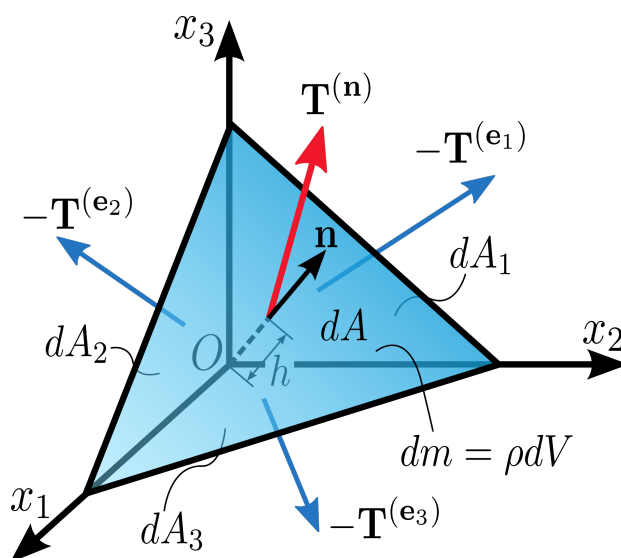


Figura II.2: Forças atuando instaneamente sobre um meio contínuo no interior de um pequeno elemento δV na forma de um tetraedo. Fonte: Internet

Novamente aplicando o teorema da divergência na equação (II.14) obtemos:

$$\mathbf{f} = \int_V (\rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV. \quad (\text{II.15})$$

Voltando agora a equação (II.13) podemos escrever

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV = \int_V (\rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV, \quad (\text{II.16})$$

e usando o teorema da localização temos a importante equação

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{II.17})$$

que é a equação de Cauchy para o movimento do fluido. O termo divergente de $\boldsymbol{\sigma}$, denotado por $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$, representa as forças de superfície por unidade de volume.

II.1 Equações em Coordenadas Cilíndricas

Apresenta-se nesta seção as equações (II.10) e (II.17) escritas em coordenadas cilíndricas, em que para a equação de Cauchy, apresenta-se as três equações referente às três direções possíveis do escoamento. Apresenta-se as componentes do tensor $\boldsymbol{\sigma}$ quando na hipótese de um fluido Newtoniano, bem como a equação do movimento (equação (II.17)) para estes fluidos.

Primeiramente considere um fluido qualquer de viscosidade μ e massa específica ρ . E seja o campo de velocidade dado por:

$$\mathbf{u}(r, \theta, z) = (u_r(r, \theta, z), u_\theta(r, \theta, z), u_z(r, \theta, z)). \quad (\text{II.18})$$

Considere ainda o campo de pressão no interior do tubo dado por $p = p(r, \theta, z)$, e finalmente, o vetor de forças $\mathbf{b} = (b_r, b_\theta, b_z)$.

Para a equação da conservação de massa ou equação da continuidade, temos, a seguinte equação para o caso geral:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho u_\theta) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z) = 0. \quad (\text{II.19})$$

Para a equação de Cauchy (II.17) destacamos as três direções, nas três equações (II.20), (II.21) e (II.22), que se seguem:

$$\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \rho b_r - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta r}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{zr}}{\partial z} - \frac{\sigma_{\theta\theta}}{r} \right]. \quad (\text{II.20})$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_\theta u_r}{r} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \rho b_\theta - \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sigma_{r\theta}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{z\theta}}{\partial z} + \frac{(\sigma_{\theta r} - \sigma_{r\theta})}{r} \right]. \quad (\text{II.21})$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho b_z - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right]. \quad (\text{II.22})$$

A título de cultura geral, mostra-se nas seis equações a seguir, as componentes do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$, no caso de um fluido Newtoniano, em que $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}$, escrito em coordenadas cilíndricas:

$$\sigma_{rr} = -p + 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r}. \quad (\text{II.23})$$

$$\sigma_{\theta\theta} = -p + 2\mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right). \quad (\text{II.24})$$

$$\sigma_{zz} = -p + 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z}. \quad (\text{II.25})$$

$$\sigma_{z\theta} = \sigma_{\theta z} = \mu \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right). \quad (\text{II.26})$$

$$\sigma_{rz} = \sigma_{zr} = \mu \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right). \quad (\text{II.27})$$

$$\sigma_{\theta r} = \sigma_{r\theta} = \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} \right). \quad (\text{II.28})$$

Agora apresenta-se as equações do movimento no caso de um fluido Newtoniano¹ de viscosidade μ_s e massa específica ρ , em termos do campo de velocidade, nas equações (II.29), (II.30) e (II.31) seguintes:

$$\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \rho b_r + \mu_s \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right]. \quad (\text{II.29})$$

¹Portanto de viscosidade constante.

$$\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_\theta u_r}{r} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \rho b_\theta +$$

$$+ \mu_s \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right]. \quad (\text{II.30})$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho b_z + \mu_s \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right].$$

(II.31)

Para finalizar apresenta-se o tensor gradiente de velocidade em coordenadas cilíndricas:

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} & \frac{\partial u_r}{\partial z} \\ \frac{\partial u_\theta}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} & \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.32})$$

III. OBJETIVIDADE DO TENSOR \mathbf{D} E DERIVADAS OLDROYD

Viu-se na definição (I.2) o que é um tensor objetivo. Nesta seção apresenta-se a objetividade do tensor simétrico taxa de deformação $\mathbf{D} = (\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)/2$ e a não objetividade do tensor anti-simétrico vorticidade $\mathbf{W} = (\nabla\mathbf{u} - (\nabla\mathbf{u})^T)/2$, em que \mathbf{u} é o campo de velocidade em questão.

Para isto considera-se a transformação homogênea [60], relativa a uma translação e rotação de corpo rígido.

$$\mathbf{x}'(t') = \mathbf{b}(t') + \mathbf{Q}(t')\mathbf{x}(t'), \quad (\text{III.1})$$

e derivando com relação ao tempo t' tem-se:

$$\frac{d\mathbf{x}'(t')}{dt'} = \dot{\mathbf{x}}'(t') = \dot{\mathbf{b}}(t') + \dot{\mathbf{Q}}(t')\mathbf{x}(t') + \mathbf{Q}(t')\dot{\mathbf{x}}(t'). \quad (\text{III.2})$$

Vamos definir que $\dot{\mathbf{x}}'(t') = \mathbf{u}'(t')$ e $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{u}(t)$. Então $\mathbf{u}'(t') = \mathbf{Q}(t')\mathbf{u}(t) + \dot{\mathbf{Q}}(t')\mathbf{x}(t)$.

Considera-se

$$d\mathbf{u}' = \mathbf{Q}d\mathbf{u} + \dot{\mathbf{Q}}d\mathbf{x}. \quad (\text{III.3})$$

Tem-se ainda, por definição, que: $\nabla\mathbf{u}d\mathbf{x} = d\mathbf{u}$ e $\nabla'\mathbf{u}'d\mathbf{x}' = d\mathbf{u}'$. Como $d\mathbf{x}' = \mathbf{Q}d\mathbf{x}$, então pode-se escrever, para um $d\mathbf{x}'$ arbitrário as equações que se seguem:

$$d\mathbf{u}' = \nabla'\mathbf{u}'d\mathbf{x}' = \mathbf{Q}d\mathbf{u} + \dot{\mathbf{Q}}d\mathbf{x}, \quad (\text{III.4})$$

$$\nabla'\mathbf{u}'d\mathbf{x}' = \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u}d\mathbf{x}) + \dot{\mathbf{Q}}d\mathbf{x}, \quad (\text{III.5})$$

$$\nabla'\mathbf{u}'d\mathbf{x}' = \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u}(\mathbf{Q}^T d\mathbf{x}')) + \dot{\mathbf{Q}}(\mathbf{Q}^T d\mathbf{x}'), \quad (\text{III.6})$$

$$\left[\nabla'\mathbf{u}' - \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}\mathbf{Q}^T - \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T \right] d\mathbf{x}' = \mathbf{0}. \quad (\text{III.7})$$

Como $d\mathbf{x}'$ é arbitrário então da equação (III.7), concluímos que:

$$\nabla'\mathbf{u}' = \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.8})$$

em geral temos que $\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T \neq \mathbf{0}$, então pela definição (I.2) o tensor $\nabla\mathbf{u}$ não é uma quantidade objetiva.

Agora, como $\nabla \mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$, e como $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$, então derivando esta última identidade temos

$$\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T = \mathbf{0}. \quad (\text{III.9})$$

Logo pela relação (III.8) temos

$$(\nabla' \mathbf{u}')^T = \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^T \mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T. \quad (\text{III.10})$$

Agora note que temos, por definição, a relação

$$\mathbf{D}' = \frac{1}{2} \left((\nabla' \mathbf{u}') + (\nabla' \mathbf{u}')^T \right), \quad (\text{III.11})$$

e pelas relações (III.8) e (III.9) obteremos a importante prova que segue:

$$\mathbf{D}' = \frac{1}{2} \left((\mathbf{Q}\nabla \mathbf{u}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T) + (\mathbf{Q}^T(\nabla \mathbf{u})^T \mathbf{Q} + \mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T) \right), \quad (\text{III.12})$$

$$\mathbf{D}' = \mathbf{Q} \left(\frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right) \mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.13})$$

$$\mathbf{D}' = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T. \quad (\text{III.14})$$

A equação (III.14) nos mostra a objetividade do tensor taxa de deformação \mathbf{D} . Não obstante o tensor vorticidade \mathbf{W} não é uma quantidade objetiva, o que pode ser provado de forma análoga ao caso acima, donde se obtém facilmente

$$\mathbf{W}' = \mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T. \quad (\text{III.15})$$

III.1 Derivadas Temporais de Jauman e Oldroyd

Vamos considerar $B = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ como sendo o conjunto de autovetores do tensor \mathbf{D} e seus respectivos vetores unitários $\{\mathbf{a}_1^0, \mathbf{a}_2^0, \mathbf{a}_3^0\}$. Vamos considerar também o conjunto A de autovetores do tensor inverso de \mathbf{D} , isto é, do tensor \mathbf{D}^{-1} , denote este conjunto por $A = \{\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3\}$. Vamos assumir num instante de tempo t_0 um arco material $d\mathbf{x}$ de comprimento unitário, isto é, $|d\mathbf{x}| = ds = 1$. Calculando a derivada material deste arco temos, por definição:

$$\frac{D(d\mathbf{x})}{Dt} = \delta \mathbf{u} = \nabla \mathbf{u} d\mathbf{x} = \mathbf{D} d\mathbf{x} + \mathbf{W} d\mathbf{x}. \quad (\text{III.16})$$

Como $d\mathbf{x} = ds \mathbf{a}_i = \mathbf{a}_i$, então teremos,

$$\frac{D(\mathbf{a}_i)}{Dt} = \mathbf{D} \mathbf{a}_i + \mathbf{W} \mathbf{a}_i. \quad (\text{III.17})$$

Sejam η_1, η_2, η_3 os autovalores de \mathbf{D} logo podemos escrever

$$\mathbf{D} = \sum_{k=1}^3 \eta_k \mathbf{a}_k \mathbf{a}_k = \eta_k \mathbf{a}_k \mathbf{a}_k. \quad (\text{III.18})$$

Deste modo escrevemos:

$$\frac{D(\mathbf{a}_i)}{Dt} = \eta_k \mathbf{a}_k \mathbf{a}_k \cdot \mathbf{a}_i + \mathbf{W} \mathbf{a}_i, \quad (\text{III.19})$$

$$\frac{D(\mathbf{a}_i)}{Dt} = \eta_k \mathbf{a}_k \delta_{ki} + \mathbf{W} \mathbf{a}_i, \quad (\text{III.20})$$

$$\frac{D(\mathbf{a}_i)}{Dt} = \eta_i \mathbf{a}_i + \mathbf{W} \mathbf{a}_i. \quad (\text{III.21})$$

A equação (III.21) mostra a evolução temporal dos vetores da base B . Sendo assim a evolução dos vetores normalizados para todo tempo t , desde que $|\mathbf{a}_i^0| = 1$, será dado por

$$\frac{D(\mathbf{a}_i^0)}{Dt} = \mathbf{W} \mathbf{a}_i^0. \quad (\text{III.22})$$

Agora vejamos como fica a evolução dos vetores da base dual A . Para isso vamos usar a relação (I.9), a lembrar: $\mathbf{a}^j \cdot \mathbf{a}_i = \delta_{ij}$, e derivando com relação ao tempo, vem que:

$$\mathbf{a}^j \cdot \frac{D\mathbf{a}_i}{Dt} + \frac{D\mathbf{a}^j}{Dt} \cdot \mathbf{a}_i = 0, \quad (\text{III.23})$$

ou

$$\frac{D\mathbf{a}^j}{Dt} \cdot \mathbf{a}_i = -\mathbf{a}^j \cdot \frac{D\mathbf{a}_i}{Dt} = -\mathbf{a}^j \cdot \nabla \mathbf{u} \mathbf{a}_i = -\left((\nabla \mathbf{u})^T \mathbf{a}^j \right) \cdot \mathbf{a}_i, \quad (\text{III.24})$$

como $\nabla \mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$ e $\mathbf{D}^T = \mathbf{D}$ e $\mathbf{W}^T = -\mathbf{W}$, assim

$$\frac{D\mathbf{a}^j}{Dt} \cdot \mathbf{a}_i = (-\mathbf{D} \cdot \mathbf{a}^j + \mathbf{W} \cdot \mathbf{a}^j) \cdot \mathbf{a}_i. \quad (\text{III.25})$$

Deste modo temos a relação

$$\frac{D\mathbf{a}^j}{Dt} = -\mathbf{D} \mathbf{a}^j + \mathbf{W} \mathbf{a}^j = -(\nabla \mathbf{u})^T \mathbf{a}^j. \quad (\text{III.26})$$

Considere agora o tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$. Iremos apresentar a derivada co-rotacional ou Jauman deste tensor na base de autovetores unitários do tensor taxa de deformação \mathbf{D} . Considere o vetores da base $\{\mathbf{a}_i^0\}$, $i = 1, 2, 3$. Que estão girando e sendo convectados com os elementos materiais, assim escrevemos:

$$\sigma_{kj}^0 = \mathbf{a}_k^0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j^0. \quad (\text{III.27})$$

Calculando a derivada temporal desta última expressão obtemos:

$$\frac{D\sigma_{kj}^0}{Dt} = \frac{D(\mathbf{a}_k^0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j^0)}{Dt}, \quad (\text{III.28})$$

$$\frac{D\sigma_{kj}^0}{Dt} = \frac{D\mathbf{a}_k^0}{Dt} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \boldsymbol{\sigma} \frac{D\mathbf{a}_j^0}{Dt}, \quad (\text{III.29})$$

agora pela equação dada em (III.22) podemos escrever, finalmente:

$$\frac{D\sigma_{kj}^0}{Dt} = \mathbf{W} \mathbf{a}_k^0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{W} \mathbf{a}_j^0, \quad (\text{III.30})$$

$$\frac{D\sigma_{kj}^0}{Dt} = \mathbf{a}_k^0 \mathbf{W}^T \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{W} \mathbf{a}_j^0, \quad (\text{III.31})$$

$$\frac{D\sigma_{kj}^0}{Dt} = \mathbf{a}_k^0 (-\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{a}_j^0 + \mathbf{a}_k^0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{W} \mathbf{a}_j^0, \quad (\text{III.32})$$

$$\frac{D\sigma_{kj}^0}{Dt} = \mathbf{a}_k^0 \left[-\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma} + \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + \boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} \right] \mathbf{a}_j^0. \quad (\text{III.33})$$

Defini-se $\frac{D\sigma_{kj}^0}{Dt}$ como sendo a derivada co-rotacional ou derivada de Jauman do tensor $\boldsymbol{\sigma}$, que corresponde a taxa de variação temporal relativa (ou vista) a um sistema de eixos (observador) girando com velocidade angular $\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}$, em que \times representa o produto vetorial usual do \mathbb{R}^3 . Denote esta derivada por:

$$\frac{\mathcal{D}\boldsymbol{\sigma}}{Dt} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + \boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}. \quad (\text{III.34})$$

Apresenta-se agora as derivadas temporais Oldroyd (baixa e alta) que são relativas a um sistema de coordenadas deformando com as linhas materiais. Para isto considere as componentes σ_{kj} do tensor $\boldsymbol{\sigma}$ relativa a base $B = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ que se deformam com as linhas materiais do elemento contínuo. Escreve-se,

$$\sigma_{kj} = \mathbf{a}_k \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j, \quad (\text{III.35})$$

e derivando com relação ao tempo, obtém-se:

$$\frac{D\sigma_{kj}}{Dt} = \frac{D(\mathbf{a}_k \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j)}{Dt}, \quad (\text{III.36})$$

$$\frac{D\sigma_{kj}}{Dt} = \frac{D\mathbf{a}_k}{Dt} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j + \mathbf{a}_k \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{a}_j + \mathbf{a}_k \boldsymbol{\sigma} \frac{D\mathbf{a}_j}{Dt}. \quad (\text{III.37})$$

Usando-se a definição (III.16), $\frac{D\mathbf{a}_k}{Dt} = \nabla \mathbf{u} \mathbf{a}_k$, pode-se escrever:

$$\frac{D\sigma_{kj}}{Dt} = \nabla \mathbf{u} \mathbf{a}_k \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j + \mathbf{a}_k \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{a}_j + \mathbf{a}_k \boldsymbol{\sigma} \nabla \mathbf{u} \mathbf{a}_j, \quad (\text{III.38})$$

$$\frac{D\sigma_{kj}}{Dt} = \mathbf{a}_k(\nabla\mathbf{u})^T \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}_j + \mathbf{a}_k \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{a}_j + \mathbf{a}_k \boldsymbol{\sigma} \nabla\mathbf{u} \mathbf{a}_j, \quad (\text{III.39})$$

$$\frac{D\sigma_{kj}}{Dt} = \mathbf{a}_k \left[(\nabla\mathbf{u})^T \boldsymbol{\sigma} + \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + \boldsymbol{\sigma} \nabla\mathbf{u} \right] \mathbf{a}_j. \quad (\text{III.40})$$

Assim definimos a equação

$$\frac{\mathfrak{D}\boldsymbol{\sigma}}{\mathfrak{D}t} = (\nabla\mathbf{u})^T \boldsymbol{\sigma} + \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + \boldsymbol{\sigma} \nabla\mathbf{u} \quad (\text{III.41})$$

como sendo a derivada co-deformação ou Oldroyd-Baixa. Esta derivada é a taxa de variação de $\boldsymbol{\sigma}$ vista por um observador que gira, translada e deforma com as partículas do fluido. Na literatura é comum encontrarmos as seguintes notações para esta derivada, são elas:

$$\frac{\mathfrak{D}\boldsymbol{\sigma}}{\mathfrak{D}t} = \boldsymbol{\delta} = (\nabla\mathbf{u})^T \boldsymbol{\sigma} + \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + \boldsymbol{\sigma} \nabla\mathbf{u}, \quad (\text{III.42})$$

ou

$$\frac{\mathfrak{D}\boldsymbol{\sigma}}{\mathfrak{D}t} = \frac{\delta_+(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = (\nabla\mathbf{u})^T \boldsymbol{\sigma} + \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + \boldsymbol{\sigma} \nabla\mathbf{u}. \quad (\text{III.43})$$

Perceba que ainda podemos usar $\nabla\mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$ e $(\nabla\mathbf{u})^T = \mathbf{D} - \mathbf{W}$ na equação (III.41) e assim teremos

$$\frac{\delta_+(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{D}\boldsymbol{\sigma}) + (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}), \quad (\text{III.44})$$

em que o termo $\frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt}$ é relacionado ao efeito de translação, $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{D}\boldsymbol{\sigma})$ é relacionado ao efeito de deformação e $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma})$ é relacionado ao efeito de rotação do material.

Considera-se, finalmente, a base $A = \{\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3\}$ dos autovetores de \mathbf{D}^{-1} . Partindo da relação

$$\sigma^{kj} = \mathbf{a}^k \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a}^j, \quad (\text{III.45})$$

e derivando no tempo, levando em conta a equação (III.26) e repetindo os cálculos como feito no caso da derivada Oldroyd-Baixa, tem-se a equação

$$\frac{\mathbb{D}\boldsymbol{\sigma}}{\mathbb{D}t} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} - \boldsymbol{\sigma}(\nabla\mathbf{u})^T - (\nabla\mathbf{u})\boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{III.46})$$

como sendo a derivada Oldroyd-Alta do tensor $\boldsymbol{\sigma}$. É comum também encontrarmos a notação para esta derivada como

$$\frac{\mathbb{D}\boldsymbol{\sigma}}{\mathbb{D}t} = \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t}. \quad (\text{III.47})$$

A título de ilustração mostra-se abaixo uma notação compacta para representar estas três últimas derivadas dadas pelas equações (III.34), (III.41) e (III.46).

$$\frac{\delta_\lambda(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = \lambda \frac{\delta_+(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} + (1 - \lambda) \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t}, \quad (\text{III.48})$$

em que λ é um número real dado, tal que $0 \leq \lambda \leq 1$. Note que se $\lambda = 0$ tem-se a derivada Oldroyd-Alta. Se $\lambda = 1$ tem-se a derivada Oldroyd-Baixa e, finalmente, se $\lambda = 1/2$ tem-se a derivada de Jauman.

III.2 Objetividade das Derivadas Temporais de Jauman e Oldroyd

Para mostrar que as derivadas de Jauman, Oldroyd-Baixa e Alta são quantidades objetivas conforme a definição (I.2) usa-se a hipótese de que o tensor σ é objetivo, isto é, $\sigma' = \mathbf{Q}\sigma\mathbf{Q}^T$. E neste ponto já se considera as relações:

$$\mathbf{W}' = \mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.49})$$

$$\frac{D'\sigma'}{Dt} = \mathbf{Q}\frac{D\sigma}{Dt}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\sigma\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\sigma\dot{\mathbf{Q}}^T. \quad (\text{III.50})$$

Note, que assim, os tensores \mathbf{W} e $\frac{D\sigma}{Dt}$, não são quantidades objetivas.

Considera-se primeiramente a derivada de Jauman dada pela equação

$$\frac{D\sigma}{Dt} = \frac{D\sigma}{Dt} + \sigma\mathbf{W} - \mathbf{W}\sigma. \quad (\text{III.51})$$

Assim, partindo da equação

$$\frac{D'\sigma'}{Dt} = \frac{D'\sigma'}{Dt} + \sigma'\mathbf{W}' - \mathbf{W}'\sigma' \quad (\text{III.52})$$

que é a equação (III.51) escrita no novo sistema de coordenada após uma rotação de corpo rígido. Substituindo as relações (III.49) e (III.50) nesta última equação tem-se:

$$\frac{D'\sigma'}{Dt} = \left(\mathbf{Q}\frac{D\sigma}{Dt}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\sigma\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\sigma\dot{\mathbf{Q}}^T \right) + (\mathbf{Q}\sigma\mathbf{Q}^T)(\mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T) - (\mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T)(\mathbf{Q}\sigma\mathbf{Q}^T).$$

Como $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$ então derivando chega-se a $\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T = -\mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T$. Usando esta identidade na última equação, após algumas manipulações algébricas, obtém-se:

$$\frac{D'\sigma'}{Dt} = \mathbf{Q}\frac{D\sigma}{Dt}\mathbf{Q}^T - \mathbf{Q}\mathbf{W}\sigma\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\sigma\mathbf{W}\mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.53})$$

ou escrito de outro modo,

$$\frac{D'\sigma'}{Dt} = \mathbf{Q}\left(\frac{D\sigma}{Dt} + \sigma\mathbf{W} - \mathbf{W}\sigma\right)\mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.54})$$

e finalmente:

$$\frac{D'\boldsymbol{\sigma}'}{Dt} = \mathbf{Q} \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{Q}^T. \quad (\text{III.55})$$

De acordo com a definição (I.2) tem-se que a derivada de Jauman é uma quantidade objetiva.

Para a derivada Oldroyd-Baixa,

$$\frac{\delta_+(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{D}\boldsymbol{\sigma}) + (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}), \quad (\text{III.56})$$

os cálculos são bem análogos. Assim partindo da equação

$$\frac{\delta'_+(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \frac{D'\boldsymbol{\sigma}'}{Dt} + (\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{D}' + \mathbf{D}'\boldsymbol{\sigma}') + (\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{W}' - \mathbf{W}'\boldsymbol{\sigma}'), \quad (\text{III.57})$$

e usando as relações (III.49) e (III.50) e o fato de que o tensor \mathbf{D} é objetivo e a hipótese de que $\boldsymbol{\sigma}$ é objetivo, então

$$\begin{aligned} \frac{\delta'_+(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = & \left(\mathbf{Q} \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\dot{\mathbf{Q}}^T \right) + \left((\mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T)(\mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T) + (\mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T)(\mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T) \right) + \\ & + \left((\mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T)(\mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T) - (\mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T)(\mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T) \right). \end{aligned} \quad (\text{III.58})$$

Usando a relação $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I} \Rightarrow \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T = -\mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T$ então, após manipulações algébricas, pode-se concluir:

$$\frac{\delta'_+(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \mathbf{Q} \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\mathbf{D}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T - \mathbf{Q}\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.59})$$

ou simplesmente

$$\frac{\delta'_+(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \mathbf{Q} \left(\frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{D}\boldsymbol{\sigma}) + (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}) \right) \mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.60})$$

$$\frac{\delta'_+(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \mathbf{Q} \frac{\delta_+(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} \mathbf{Q}^T. \quad (\text{III.61})$$

E pela definição (I.2) tem-se que a derivada Oldroyd-Baixa é também uma quantidade objetiva.

Finalmente para a derivada Oldroyd-Alta,

$$\frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} - \boldsymbol{\sigma}(\nabla\mathbf{u})^T - (\nabla\mathbf{u})\boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{III.62})$$

como sempre partindo da relação

$$\frac{\delta'_-(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \frac{D'\boldsymbol{\sigma}'}{Dt} - \boldsymbol{\sigma}'(\nabla'\mathbf{u}')^T - (\nabla'\mathbf{u}')\boldsymbol{\sigma}', \quad (\text{III.63})$$

e usando as relações (III.50), (III.8) e (III.10), obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\delta'_-(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} &= \left(\mathbf{Q} \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Q}^T + \mathbf{Q} \boldsymbol{\sigma} \dot{\mathbf{Q}}^T \right) - \mathbf{Q} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Q}^T \left(\mathbf{Q} (\nabla \mathbf{u})^T \mathbf{Q}^T + \mathbf{Q} \dot{\mathbf{Q}}^T \right) - \\ &\quad - \left(\mathbf{Q} (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}} \mathbf{Q}^T \right) \mathbf{Q} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Q}^T, \end{aligned} \quad (\text{III.64})$$

e novamente usando a relação $\mathbf{Q} \mathbf{Q}^T = \mathbf{I} \Rightarrow \dot{\mathbf{Q}} \mathbf{Q}^T = -\mathbf{Q} \dot{\mathbf{Q}}^T$, após manipulações algébricas, chega-se a:

$$\frac{\delta'_-(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \mathbf{Q} \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} \mathbf{Q}^T - \mathbf{Q} \boldsymbol{\sigma} (\nabla \mathbf{u})^T \mathbf{Q}^T - \mathbf{Q} (\nabla \mathbf{u}) \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.65})$$

$$\frac{\delta'_-(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \mathbf{Q} \left(\frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} - \boldsymbol{\sigma} (\nabla \mathbf{u})^T - (\nabla \mathbf{u}) \boldsymbol{\sigma} \right) \mathbf{Q}^T, \quad (\text{III.66})$$

$$\frac{\delta'_-(\boldsymbol{\sigma}')}{\delta t} = \mathbf{Q} \frac{\delta_-(\boldsymbol{\sigma})}{\delta t} \mathbf{Q}^T. \quad (\text{III.67})$$

E a derivada Oldroyd-Alta é também uma quantidade objetiva.

IV. MÉTODOS DE RUNGE KUTTA

IV.1 Breve Estudo Sobre o Método de Quadratura

Seja $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função real. Quer-se calcular o valor numérico da integral $\int_a^b f(t) dt$. A ideia intuitiva é assumir esta soma infinita numa soma finita e para o caso mais geral considera-se uma função peso $w(\varepsilon)$ tal que

$$0 < \int_a^b w(\varepsilon) d\varepsilon \quad \text{e} \quad \left| \int_a^b \varepsilon^j w(\varepsilon) d\varepsilon \right| < \infty, \quad (\text{IV.1})$$

aqui $j \in \mathbb{N}$. Então com esta função peso pode-se calcular

$$\int_a^b f(\varepsilon)w(\varepsilon) d\varepsilon \approx \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j), \quad (\text{IV.2})$$

em que c_j são os nós da quadratura e b_j os pesos da quadratura, e estes só dependem dos limites do intervalo a, b e da função w .

Defini-se que a representação da integral por esta quadratura é de ordem p se ela integra exatamente polinômios de grau $p - 1$.

Teorema IV.1 (Kernel de Peano) *Seja f uma função que tenha pelo menos p derivadas então sua quadratura será de ordem p , se, e só se,*

$$\left| \int_a^b f(\varepsilon)w(\varepsilon) d\varepsilon - \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j) \right| < c \max |f^{(p)}(t)|, \quad (\text{IV.3})$$

com $t \in [a, b]$ e $c > 0$ independente de $f(t)$. Onde a notação $f^{(p)}$ indica a derivada p -éssima da função f .

Para cada escolha de um conjunto de nós da quadratura é possível encontrar um único conjunto de pesos $\{b_1, b_2, \dots, b_{\nu}\}$ tais que a ordem da quadratura seja $p \geq \nu$. Vamos escolher a base $\{1, t, t^2, \dots, t^{\nu-1}\}$ para o espaço vetorial dos polinômios de grau $\nu - 1$, de maneira que podemos escrever: $f(t) = 1 + t + t^2 + \dots + t^{\nu-1}$.

Aplicando o teorema (IV.1) nesta base teremos que $f^{(\nu)}(t) = 0$ para todo t em $[a, b]$. E assim só nos resta admitir a igualdade

$$\int_a^b t^m w(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j (c_j)^m, \quad \text{com } m = 0, 1, 2, \dots, \nu - 1. \quad (\text{IV.4})$$

Fazendo m variar de zero até $\nu - 1$, temos um conjunto de ν equações, das quais explicitamos algumas:

$$m = 0 \Rightarrow b_1 + b_2 + b_3 + \dots + b_\nu = \int_a^b w(\varepsilon) d\varepsilon = A_0. \quad (\text{IV.5})$$

$$m = 1 \Rightarrow b_1 c_1 + b_2 c_2 + \dots + b_\nu c_\nu = \int_a^b \varepsilon w(\varepsilon) d\varepsilon = A_1. \quad (\text{IV.6})$$

$$m = 2 \Rightarrow b_1 c_1^2 + b_2 c_2^2 + \dots + b_\nu c_\nu^2 = \int_a^b \varepsilon^2 w(\varepsilon) d\varepsilon = A_2. \quad (\text{IV.7})$$

⋮

$$m = \nu - 1 \Rightarrow b_1 c_1^{\nu-1} + b_2 c_2^{\nu-1} + \dots + b_\nu c_\nu^{\nu-1} = \int_a^b \varepsilon^{\nu-1} w(\varepsilon) d\varepsilon = A_{\nu-1}. \quad (\text{IV.8})$$

Este sistema, na forma matricial, será do tipo de Vandermonde, que pode ser representado como:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ c_1 & c_2 & c_3 & \dots & c_\nu \\ c_1^2 & c_2^2 & c_3^2 & \dots & c_\nu^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_1^{\nu-1} & c_2^{\nu-1} & c_3^{\nu-1} & \dots & c_\nu^{\nu-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_\nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_{\nu-1} \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.9})$$

assim dados c_j ($j = 1, 2, \dots, \nu$) em que $c_i \neq c_j$ para todo $i \neq j$ então o sistema apresentado pela forma matricial acima possui única solução.

A pergunta que surge neste momento é, como encontrar os c_j ideais? Considera-se o polinômio $P(t)$ de grau $\nu - 1$ da forma $P(t) = \sum_{j=1}^{\nu} P(c_j) p_j(t)$ em que, para cada j , temos¹

$$p_j(t) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{\nu} \frac{t - c_k}{c_j - c_k}. \quad (\text{IV.10})$$

Pela equação (IV.4) e pela consideração acima podemos escrever:

$$\sum_{j=1}^{\nu} b_j (c_j)^m = \int_a^b \varepsilon^m w(\varepsilon) d\varepsilon = \int_a^b \left[\sum_{j=1}^{\nu} (c_j)^m p_j(\varepsilon) \right] w(\varepsilon) d\varepsilon = \sum_{j=1}^{\nu} (c_j)^m \int_a^b p_j(\varepsilon) w(\varepsilon) d\varepsilon.$$

E por simples comparação temos uma expressão para os pesos da quadratura como sendo

$$b_j = \int_a^b p_j(\varepsilon) w(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (\text{IV.11})$$

¹Estes são chamados de Polinômios de Lagrange.

deste modo dados $\{c_1, c_2, \dots, c_\nu\}$ encontramos os $p_j(t)$ polinômios de Lagrange, e desta forma encontramos os b_j , para $j = 1, 2, \dots, \nu$. Com tudo isto até agora, podemos construir as fórmulas de Newton-Côtes de ordem ν .

Para escolher os c_j de maneira ótima, definimos o produto no espaço das funções como:

Definição IV.2 *Sejam dadas as funções reais f, g e $w : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, nas quais as funções f e g devem satisfazer*

$$\int_a^b f^2(\varepsilon)w(\varepsilon) d\varepsilon < \infty \quad e \quad \int_a^b g^2(\varepsilon)w(\varepsilon) d\varepsilon < \infty$$

*Assim o produto de f pela g , com o peso w , denotado por $f * g$, é dado por*

$$f * g = \int_a^b f(\varepsilon)g(\varepsilon)w(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Dizemos que um polinômio P_m de grau m é ortogonal se, $P_m * h = 0$, para todo polinômio h de grau $m - 1$. Neste caso P_m é dito ortogonal de grau m . Apresentamos agora três resultados importantes acerca de polinômios ortogonais. O leitor mais curioso pode procurar suas demonstrações em [38].

Teorema IV.3 *O polinômio ortogonal de grau m tem seus m zeros reais no interior do intervalo (a, b) e todos estes zeros possui multiplicidade um.*

Teorema IV.4 *Sejam $\{b_1, b_2, \dots, b_\nu\}$ os pesos calculados pelo sistema de Vandermonde e sejam $\{c_1, c_2, \dots, c_\nu\}$ os zeros de P_ν no intervalo (a, b) . Então:*

1. *A quadratura $\int_a^b f(\varepsilon)w(\varepsilon) d\varepsilon = \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j)$ possui ordem 2ν ;*

2. *Nenhuma outra quadratura pode exceder esta ordem.*

Estas quadraturas construídas com polinômios ortogonais são chamadas de quadraturas gaussianas.

Corolário IV.5 *Seja $r(t)$ um polinômio de grau ν ortogonal a polinômios de grau menores ou iguais a $m - 1$ em que $m \in \{1, 2, \dots, \nu\}$. Então, se $\{c_1, c_2, \dots, c_\nu\}$ forem os zeros de $r(t)$ e escolhendo $\{b_1, b_2, \dots, b_\nu\}$ pelo sistema de Vandermonde, então podemos construir uma quadratura de ordem $\nu + m$.*

Estes métodos que se utilizam da quadratura são os métodos de Runge-Kutta. Vamos aplicar as técnicas de quadratura para resolver, de forma numérica, o problema de valor inicial (PVI) dado por,

$$y'(t) = \frac{dy}{dt} = f(t, y), \text{ e } y(0) = y_0, \quad (\text{IV.12})$$

em que $y = y(t) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função real.

Considera-se a representação integral para o processo iterativo de solução numérica do PVI

$$y_{n+1} = y(t_{n+1}) = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t', y(t')) dt', \quad (\text{IV.13})$$

fazendo $t' = t_n + \alpha h = t'(\alpha)$, em que² $t_{n+1} = t_n + h$, $n \in \mathbb{N}$ e $\alpha \in [0, 1]$, então

$$y_{n+1} = y_n + h \int_0^1 f(t_n + \alpha h, y(t_n + \alpha h)) d\alpha. \quad (\text{IV.14})$$

Usando o resultado da equação (IV.4), pode-se escrever,

$$\int_0^1 f(t_n + \alpha h, y(t_n + \alpha h)) d\alpha = \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(t_n + c_j h, y(t_n + c_j h)), \quad (\text{IV.15})$$

para $n \in \mathbb{N}$ e $c_j \in (0, 1)$, $j = 1, 2, \dots, \nu$.

Note que ainda não temos os valores para $y(t_n + c_j h)$. Vamos chama-lós de ξ_j e escrevemos $y(t_n + c_j h) = \xi_j$ para $j = 1, 2, \dots, \nu$. Neste ponto vamos propor uma aproximação em sequência para construirmos os ξ_j . Vejamos:

$$\xi_0 = y_0 = y(t_0), \text{ condição inicial do PVI}, \quad (\text{IV.16})$$

$$\xi_1 = y_n = y(t_n), \quad (\text{IV.17})$$

$$\xi_2 = y_n + h a_{21} f(t_n, \xi_1), \quad (\text{IV.18})$$

$$\xi_3 = y_n + h [a_{31} f(t_n, \xi_1) + a_{32} f(t_n + c_2 h, \xi_2)], \quad (\text{IV.19})$$

$$\xi_4 = y_n + h [a_{41} f(t_n, \xi_1) + a_{42} f(t_n + c_2 h, \xi_2) + a_{43} f(t_n + c_3 h, \xi_3)], \quad (\text{IV.20})$$

⋮

$$\xi_\nu = y_n + h \sum_{i=1}^{\nu-1} a_{\nu i} f(t_n + c_i h, \xi_i). \quad (\text{IV.21})$$

E podemos finalmente escrever

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{\nu-1} b_j f(t_n + c_j h, \xi_j). \quad (\text{IV.22})$$

² h é o comprimento da partição do intervalo de integração.

IV.1.1 Método de Runge-Kutta de ν Estágios

Temos que são necessários três grupos de parâmetros para avançarmos do passo y_n para y_{n+1} , para a solução do PVI, são eles: a_{ij}, b_j e c_j . Devemos notar, inicialmente, que podemos escrever $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_\nu)$ e $\mathbf{c} = (0, c_2, c_3 \dots, c_\nu)$. Para os parâmetros a_{ij} a maneira mais comum (e prática) de representá-los é na forma matricial, em que a matriz \mathbf{A} abaixo é quadrada de ordem ν :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{\nu 1} & a_{\nu 2} & \dots & a_{\nu-1} & 0 \end{pmatrix}_{\nu \times \nu} . \quad (\text{IV.23})$$

É costume na literatura indicar o método de Runge-Kutta pela tabela (IV.1) abaixo

Tabela IV.1: Tabela de Runge-Kutta ou Butcher

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c}^T & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b} \end{array}$$

Determinar a tabela de Butcher para métodos específicos não é uma tarefa trivial. Vamos fazer um exemplo para $\nu = 2$ estágios. Assim teremos $\xi_1 = y_n$ e

$$\xi_2 = y_n + h a_{21} f(t_n, \xi_1), \quad (\text{IV.24})$$

$$y_{n+1} = y_n + h b_1 f(t_n, \xi_1) + h b_2 f(t_n + c_2 h, \xi_2) \quad (\text{IV.25})$$

E assim a tabela de Butcher ficará:

Tabela IV.2: Tabela de Butcher para dois estágios

$$\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix} 0 \\ c_2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix} \\ \hline & \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} \end{array}$$

Neste ponto pode-se expandir $f(t_n + c_2 h, \xi_2)$ em série de Taylor, e desta maneira obtém-

se:

$$f(t_n + c_2 h, y_n + h a_{21} f(t_n, \xi_1)) = f(t_n, y_n) + c_2 h \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_n + h a_{21} f(t_n, y_n) \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_n + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{IV.26})$$

E substituindo a equação (IV.26) na equação (IV.25) teremos a expressão

$$y_{n+1} = y_n + h b_1 f(t_n, \xi_1) + h b_2 \left[f(t_n, y_n) + h c_2 \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_n + h a_{21} \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n f(t_n, y_n) + \mathcal{O}(h^2) \right]. \quad (\text{IV.27})$$

Reagrupando, temos

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 + b_2) f(t_n, y_n) + h^2 \left[b_2 c_2 \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_n + b_2 a_{21} \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n f(t_n, y_n) \right] + \mathcal{O}(h^3) \quad (\text{IV.28})$$

Ainda podemos expandir a função $y(t_{n+1})$ (caso geral) em série de Taylor, e teremos a expressão

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h y'(t_n) + \frac{h^2}{2!} y''(t_n) + \mathcal{O}(h^3), \quad (\text{IV.29})$$

mas por definição do PVI, temos, $y'(t_n) = f(t_n, y_n)$ e ainda podemos escrever da derivada segunda de $y(t_n)$ como segue

$$y''(t_n) = \frac{d}{dt} f(t_n, y(t_n)) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_n + f(t_n, y_n) \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n. \quad (\text{IV.30})$$

Substituindo estas duas últimas considerações na equação (IV.29) e depois comparando termo a termo com a equação (IV.28), obtemos o sistema:

$$\begin{cases} h(b_1 + b_2) = h, \\ h^2(b_2 c_2) = h^2/2, \\ h^2 b_2 a_{21} = h^2/2. \end{cases} \quad (\text{IV.31})$$

Como o comprimento h da partição do intervalo $[a, b]$ é tal que $t_{n+1} - t_n = h \neq 0$, então nosso sistema se reduz a

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1, \\ b_2 c_2 = 1/2, \\ b_2 a_{21} = 1/2. \end{cases} \quad (\text{IV.32})$$

Note que o sistema (IV.32) possui infinitas soluções. Em particular podemos usar $c_2 = 1$ e daí $b_2 = b_1 = 1/2$ e $a_{21} = 1$ e deste modo teremos $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \xi_2)]$ em que $\xi_2 = y_n + h f(t_n, \xi_1)$ e $\xi_1 = y(t_n)$. Apresenta-se a tabela (IV.3) como sendo a tabela de Butcher neste caso.

Tabela IV.3: Tabela de Butcher para $\nu = 2$ estágios.

$$\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hline & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{array}$$

A título de ilustração apresenta-se os casos de $\nu = 3$ estágios e $\nu = 4$ estágios. Primeiramente o caso $\nu = 3$, como no caso $\nu = 2$ tem-se:

$$\xi_1 = y_n = y(t_n), \quad (\text{IV.33})$$

$$\xi_2 = y_n + ha_{21}f(t_n, \xi_1), \quad (\text{IV.34})$$

$$\xi_3 = y_n + h \left[a_{31}f(t_n, \xi_1) + a_{32}f(t_n + c_2h, \xi_2) \right], \quad (\text{IV.35})$$

$$y_{n+1} = y_n + h \left[b_1 f(t_n, \xi_1) + b_2 f(t_n + c_2h, \xi_2) + b_3 f(t_n + c_3h, \xi_3) \right]. \quad (\text{IV.36})$$

E procedendo inteiramente análogo ao caso de $\nu = 2$ estágios, anteriormente, obtém-se o sistema:

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 = 1, \\ b_2 c_2 + b_3 c_3 = 1/2, \\ b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = 1/3, \\ b_3 a_{32} c_2 = 1/6. \end{cases} \quad (\text{IV.37})$$

E aqui apresenta-se alguns exemplos de métodos de 3 estágios, que apresenta-se nas tabelas (IV.4) e (IV.5) a seguir:

Tabela IV.4: Método de Runge-Clássico.

$$\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \end{pmatrix} \\ \hline & \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix} \end{array}$$

Tabela IV.5: Método de Nystrom.

$$\begin{array}{c|ccc} \begin{pmatrix} 0 \\ 2/3 \\ 2/3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2/3 & 0 \end{pmatrix} \\ \hline & \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{8} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \end{array}$$

O método mais conhecido e utilizado (o qual é utilizado nesta tese), é o de Runge-Kutta de $\nu = 4$ estágios e quarta ordem³ dado pela seguinte tabela de Butcher

Tabela IV.6: Método de Runge-Kutta de quatros estágios e quarta ordem.

$$\begin{array}{c|cccc} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hline & \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix} \end{array}$$

Neste caso o algoritmo se explicita da seguinte forma:

$$\xi_1 = y_n = y(t_n), \quad (\text{IV.38})$$

$$\xi_2 = y_n + h/2 f(t_n, \xi_1), \quad (\text{IV.39})$$

$$\xi_3 = y_n + h/2 f(t_n + h/2, \xi_2), \quad (\text{IV.40})$$

$$\xi_4 = y_n + h f(t_n + h, \xi_3), \quad (\text{IV.41})$$

e finalmente,

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{1}{6} f(t_n, \xi_1) + \frac{1}{3} f(t_n + h/2, \xi_2) + \frac{1}{3} f(t_n + h/2, \xi_3) + \frac{1}{6} f(t_n + h, \xi_4) \right]. \quad (\text{IV.42})$$

³No sentido de convergência do método, isto é, o erro ao avaliar $y(t_{n+1})$ decai em quarta ordem quando passamos do estágio n para o $n + 1$ no processo iterativo. A prova desta afirmação pode ser vista em [38].

V. ALGORITMO DAS FRAÇÕES CONTINUADAS

Passa-se a explicitar o algoritmo utilizado nesta tese para resolver as frações continuadas da seção (6.2). O código apresentado abaixo foi desenvolvido para o FORTRAN90 e evidentemente não é a única maneira de se fazer! Passa-se a listar os passos para a obtenção da função η' . Para se obter as funções η'' , G' e G'' o caso é análogo, bastando para isso apenas mudar as condições iniciais do **Passo 2** abaixo. Lembre que são dados $p + 1$ frequências $\{\omega_0, \dots, \omega_p\}$ e seus respectivos valores de η' . Assumi-se sem perda de generalidade que: $\omega_i < \omega_{i+1}$, para todo $i = 0, \dots, p - 1$.

- **Passo 1:** Defina as funções polinomiais $A_p(\varpi)$ e $B_p(\varpi)$ como matrizes de tamanho $(p+2) \times (M+1)$, em que $p+1$ é a quantidade de ω dos seus dados experimentais e M é a quantidade de pontos considerados na partição do intervalo $[\omega_0, \omega_p] \ni \varpi$.¹ No nosso caso fizemos $A(-1 : p, 0 : M)$ e $B(-1 : p, 0 : M)$. Isto significa que nossas matrizes possuem linhas (funções) de -1 até p , i.e., $p + 2$ linhas (funções); e possuirá colunas de 0 até M , i.e., $M + 1$ colunas. Isto porque cada função $A_n(\varpi)$, $n = -1, \dots, p$, deve variar em todo seu domínio, no caso $\varpi \in [\omega_0, \omega_p]$.

- **Passo 2:** Defina:

$$\left\{ \begin{array}{l} A(-1, :) = 0; \\ A(0, :) = \eta'(0); \\ B(-1, :) = 1; \\ B(0, :) = 1; \\ \alpha(0) = \eta'(0); \\ \alpha(1) = [\eta'(0)/\eta'(1) - 1]/[\omega(1) - \omega(0)], \end{array} \right. \quad (\text{V.1})$$

em que usa-se a correspondência $\eta'_i = \eta'(i)$, $\alpha_i = \alpha(i)$ e $\omega_i = \omega(i)$. A notação, por exemplo, $A(-1, :) = 0$ quer dizer que a primeira função A_{-1} (no caso a função de

¹Cuidado! ω denota os valores dos dados experimentais e para os valores dos pontos de uma partição qualquer do intervalo $[\omega_0, \omega_p]$ usamos ϖ . É claro que alguns pontos ϖ podem ser ou não iguais a ω .

posição -1) será sempre nula para todo $\varpi \in [\omega_0, \omega_p]$. Analogamente $A(0, :) = \eta'(0)$, quer dizer que a segunda função A_0 (no caso a de posição zero) possui valor constante $\eta'(0)$ para todo $\varpi \in [\omega_0, \omega_p]$. Mesmo significado para $B(-1, :) = 1$.

- **Passo 3:** Defina uma partição para o conjunto $[\omega_0, \omega_p]$, por exemplo, pode-se fazer $dt = (\omega_p - \omega_0)/M$ e faça $\varpi(i) = \omega_0 + idt$, para $i = 0, \dots, M$.

- **Passo 4:** Determinando $F_j = F(j)$, $\alpha(j)$ e $\beta_j = \beta(j)$. Faça, para cada $j = 2, \dots, p$

$$x(1) = 1 - \eta'(0)/\eta'(j), \quad (\text{V.2})$$

e ainda para cada $k = 2, \dots, j$ considere

$$x(k) = 1 + [\omega(j) - \omega(k-2)]\alpha(k-1)/x(k-1), \quad (\text{V.3})$$

em que $x(k)$ é um vetor auxiliar. E finalmente escreva, para $j = 2, \dots, p$:

$$\begin{cases} F(j) = x(j); \\ \beta(j) = [\omega(j-1) - \omega(j)]^{-1}; \\ \alpha(j) = \beta(j)F(j). \end{cases} \quad (\text{V.4})$$

- **Passo 5:** Determinar todas as funções $\eta'_n(\varpi)$. Para cada $n = 0, \dots, p-1$, faça j variar em $0, \dots, M$ e escreva:

$$A(n+1, j) = A(n, j) + (\varpi(j) - \omega(n))\alpha(n+1)A(n-1, j); \quad (\text{V.5})$$

$$B(n+1, j) = B(n, j) + (\varpi(j) - \omega(n))\alpha(n+1)B(n-1, j); \quad (\text{V.6})$$

$$\eta'_{n+1}(\varpi) = A(n+1, j)/B(n+1, j). \quad (\text{V.7})$$

Como o interesse é a função $\eta_p(\varpi)$, escreva no arquivo de saída o caso em que $n = p-1$, para todo $j = 0, \dots, M$.

VI. UM EXEMPLO DE ESCOAMENTO CAPILAR

Neste apêndice apresenta-se uma solução analítica do escoamento de um fluido viscoelástico de massa específica ρ , que escoam em tubo de raio R , para isto considere um polímero líquido no referido tubo oscilando devido a um gradiente de pressão com variação senoidal dada pela equação:

$$-\frac{\partial p}{\partial z} = p_0 \exp(i\omega t), \quad i = \sqrt{-1}, \quad (\text{VI.1})$$

em que p_0 é a amplitude da pressão p . Supõe-se esta amplitude pequena para garantir a aproximação de pequenos deslocamentos. A frequência de excitação ω é constante.

Tem-se que o campo de velocidade $\mathbf{u} = (u_r, u_\theta, u_z(r, t))$, com $0 \leq z \leq C$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$ e $0 \leq r \leq R$, do fluido é tal que segue as seguintes hipóteses: 1) $u_z(r, t) = u_z^0(r) \exp(i\omega t)$, isto é, a velocidade na direção do eixo z também oscila. 2) $u_r = 0$, isto é, a velocidade na direção do eixo r é nula. 3) Tem-se ainda que $u_\theta = 0$, isto é, o fluido não gira ao se deslocar. Das componentes do tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ a única que nos interessa é a entrada σ_{rz} , que é dada por

$$\sigma_{rz} = \sigma_{rz}^0(r) \exp(i\omega t). \quad (\text{VI.2})$$

A formulação física do problema nos leva à seguinte equação diferencial parcial (EDP):

$$\rho \frac{\partial u_z}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rz}). \quad (\text{VI.3})$$

Agora para a componente σ_{rz} do tensor de tensões, temos que a mesma será dada por

$$\sigma_{rz} = \int_{-\infty}^t \Phi(t-t') \frac{\partial u_z}{\partial r}(r, t') dt'. \quad (\text{VI.4})$$

Ainda deve-se assumir $u_z^0 = u_z(r, 0) = 0$ quando $r = R$ e que u_z^0 é finito para $r = 0$. Substituindo as equações (VI.1) e (VI.2) e a expressão $u_z(r, t) = u_z^0(r) \exp(i\omega t)$, na equação (VI.3), obtém-se:

$$\rho i \omega u_z^0 = p^0 + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \sigma_{rz}^0). \quad (\text{VI.5})$$

Fazendo $s = s(t') = t - t'$ na equação (VI.4) tem-se

$$\sigma_{rz} = \left[\int_0^{+\infty} \Phi(s) \exp(-i\omega s) ds \right] \frac{du_z^0}{dr} \exp(i\omega t), \quad (\text{VI.6})$$

e ao se comparar as equações (VI.6) e (VI.2), vem que

$$\sigma_{rz}^0(r) = \left[\int_0^{+\infty} \Phi(s) \exp(-i\omega s) ds \right] \frac{du_z^0}{dr}, \quad (\text{VI.7})$$

ou ainda, usando a equação (2.131), pode-se escrever σ_{rz}^0 em termos da viscosidade complexa η^* , como sendo

$$\sigma_{rz}^0 = \eta^* \frac{du_z^0}{dr}. \quad (\text{VI.8})$$

E substituindo esta última equação na equação (VI.5) e desenvolvendo a derivada lá indicada e dividindo tudo por η^* tem-se a seguinte EDO de segunda ordem:

$$\frac{d^2 u_z^0}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_z^0}{dr} - \frac{i\rho\omega u_z^0}{\eta^*} + \frac{p^0}{\eta^*} = 0. \quad (\text{VI.9})$$

Chamando $\alpha^2 = \frac{-i\omega\rho}{\eta^*}$ e multiplicando toda a EDO da equação (VI.9) por r^2 , tem-se finalmente, a EDO de segunda ordem de Bessel

$$r^2 \frac{d^2 u_z^0}{dr^2} + r \frac{du_z^0}{dr} + (\alpha r)^2 u_z^0 + \frac{p^0 r^2}{\eta^*} = 0. \quad (\text{VI.10})$$

Lembre-se que toda EDO de segunda ordem possui como solução geral a soma de duas funções que são: a solução da homogênea $u_h^0(r)$ e a solução particular $u_p^0(r)$, de modo que pode se escrever:

$$u_z^0(r) = u_h^0(r) + u_p^0(r). \quad (\text{VI.11})$$

A forma mais geral de uma EDO de Bessel é dada por

$$r^2 \frac{d^2 f}{dr^2} + r \frac{df}{dr} + r^2 f - \nu^2 f = 0, \quad (\text{VI.12})$$

em que $\nu \in \mathbb{N}$ e cuja solução é dada por

$$f(r) = C_1 J_\nu(r) + C_2 Y_\nu(r). \quad (\text{VI.13})$$

Logo abaixo explicita-se a função de Bessel de segunda espécie de ordem $n = 0$, ou função de Newmann, $Y_0(x) = N_0(x)$, porém explicita-se, inicialmente, a função de Bessel de ordem n e de primeira espécie:

$$J_n(x) = x^n \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{(-1)^m x^{2m}}{2^{2m+n} m! \Gamma(n+m+1)}, \quad (\text{VI.14})$$

na qual a função gamma é dada por

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{+\infty} \exp(-t) t^{(\alpha-1)} dt \quad (\text{VI.15})$$

e $\alpha \in \mathbb{N}$. Abaixo explicita-se as duas importantes propriedades da função gamma¹:

$$\begin{cases} \Gamma(\alpha + 1) = \alpha\Gamma(\alpha) = \alpha!, \\ \Gamma(1) = 1. \end{cases} \quad (\text{VI.16})$$

Agora usa-se o limite assintótico da equação (VI.14) quando $n = 0$ e $n = 1$, a saber:

$$\begin{cases} J_0(x) = 1 - \frac{x^2}{2^2(1!)^2} + \frac{x^4}{2^4(2!)^2} - \frac{x^6}{2^6(3!)^2} + \dots \\ J_1(x) = \frac{x}{2} - \frac{x^3}{2^3(1!)(2!)} + \frac{x^5}{2^5(2!)(3!)} - \frac{x^7}{2^7(3!)(4!)} + \dots \end{cases} \quad (\text{VI.17})$$

Explicita-se a função $Y_0(x) = N_0(x)$, na equação

$$N_0(x) = Y_0(x) = \frac{2}{\pi} \left[J_0(x) \left(\ln \left(\frac{x}{2} \right) + \varsigma \right) + \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{m-1} h_m x^{2m}}{2^{2m}(m!)^2} \right], \quad (\text{VI.18})$$

aqui $\varsigma \approx 0.57721566$ é a constante de Euler e h_m é o somatório, $h_m = \sum_{j=1}^m \frac{1}{j}$.

Findo estas considerações sobre a EDO de Bessel, considere novamente a solução do nosso problema original. Seja determinar u_p^0 quando $\frac{du_p^0}{dr} = 0$, e ao substituir esta hipótese na equação (VI.10) tem-se

$$(\alpha r)^2 u_z^0 + \frac{p^0 r^2}{\eta^*} = 0, \quad (\text{VI.19})$$

e

$$u_p^0 = -\frac{p_0}{\alpha^2 \eta^*} = \frac{p_0}{i\omega\rho}, \quad (\text{VI.20})$$

como solução particular. Finalmente, pelo que foi exposto acima, tem-se nossa solução geral do problema proposto neste apêndice, dada por:

$$u_z^0(r) = \frac{p_0}{i\omega\rho} + C_1 J_0(\alpha r) + C_2 N_0(\alpha r). \quad (\text{VI.21})$$

Agora pelas condições de contorno do problema deve-se ter que $u_z^0(r = 0)$ é finita, e como na equação (VI.18) temos uma singularidade em $x = \alpha r = 0$, então $C_2 = 0$. Agora como deve-se ainda ter $u_z^0(r = R) = 0$, então

$$0 = \frac{p_0}{i\omega\rho} + C_1 J_0(\alpha R), \quad (\text{VI.22})$$

e

$$C_1 = -\frac{p_0}{i\omega\rho} \frac{1}{J_0(\alpha R)}. \quad (\text{VI.23})$$

¹Na verdade esta propriedade vale para qualquer $\alpha \in \mathbb{R}$, só que assim perdemos o fatorial.

Assim temos finalmente a solução de nossa função u_z^0 , com as condições de contorno já aplicadas:

$$u_z^0(r) = \frac{p_0}{i\rho\omega} \left[1 - \frac{J_0(\alpha r)}{J_0(\alpha R)} \right]. \quad (\text{VI.24})$$

Para enriquecer um pouco mais o problema, propõe-se o cálculo da vazão. Como definido na equação (7.8), tem-se

$$Q = \int_{\text{área}} \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, d\mathbf{A}, \quad (\text{VI.25})$$

aqui $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor normal unitário à superfície. Como o campo de velocidade é oscilatório então a vazão será da forma $Q = Q^0 \exp(i\omega t)$, e como a geometria do problema é cilíndrica, o cálculo da vazão Q^0 será dada simplesmente por:

$$Q^0 = \int_{\text{área}} \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, d\mathbf{S} = 2\pi \int_0^R u_z^0(r) r \, dr. \quad (\text{VI.26})$$

E ao substituir a equação (VI.24) na equação (VI.26) tem-se,

$$Q^0 = 2\pi \int_0^R \frac{p_0}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{J_0(\alpha r)}{J_0(\alpha R)} \right] r \, dr = \frac{\pi R^2 p_0}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{2J_1(\alpha R)}{\alpha R J_0(\alpha R)} \right], \quad (\text{VI.27})$$

para obter a última igualdade na equação (VI.27) usa-se a fórmula de recorrência

$$\int x^\nu J_{\nu-1}(x) \, dx = x^\nu J_\nu(x) + cte, \quad (\text{VI.28})$$

em que $\nu \in \mathbb{N}$ e $cte = \text{constante}$. Agora ao usar as soluções assintóticas dadas pela equação (VI.17), tem-se que a expressão para Q , é do tipo

$$Q = \frac{-\Delta p R^4 \pi}{8\mu C}, \quad (\text{VI.29})$$

que nada mais é que a lei de Poiseuille vista na equação (7.9).