

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MODELAGEM NUMÉRICA E MECÂNICA DE ESCOAMENTOS
ELASTO-VISCOPLÁSTICOS TIXOTRÓPICOS: INVESTIGAÇÕES COM UMA
NOVA FUNÇÃO VISCOPLÁSTICA

por

Márleson Rôndiner dos Santos Ferreira

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2018

MODELAGEM NUMÉRICA E MECÂNICA DE ESCOAMENTOS
ELASTO-VISCOPLÁSTICOS TIXOTRÓPICOS: INVESTIGAÇÕES COM UMA
NOVA FUNÇÃO VISCOPLÁSTICA

por

Márleson Rôndiner dos Santos Ferreira
Mestre em Matemática Aplicada

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Luiz Frey

Aprovada por:

Prof. Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani PPGEM / UNISINOS

Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli PPGMAP / UFRGS

Profa. Dra. Adriane Prisco Petry PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 17 de Janeiro de 2018

“Todas as vitórias ocultam uma abdicação”.

Simone de Beauvoir

(1908 - 1986)

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro para a elaboração desta tese.

Agradeço ao PROMEC/UFRGS pelos anos que pude usufruir da sua estrutura e todo ambiente acadêmico.

Agradeço ao prof. Paulo Mendes e profa. Mônica Naccache do Grupo de Reologia (GReo), na PUC-RJ, pela parceria que se estende ao Laboratório de Mecânica dos Fluidos Aplicada e Computacional (LAMAC) da UFRGS, e por todo o suporte literário e discussões que enriqueceram o trabalho.

Agradeço ao meu orientador, prof. Sérgio Frey, pelas conversas em que pude ampliar meu conhecimento acadêmico.

Agradeço ao prof. Matteo Pasquali, seus alunos e toda a infraestrutura da Rice University (em Houston, TX-EUA), onde dediquei um ano inteiro de pesquisas com suporte do seu grupo de pesquisa CF2 (Complex Flows of Complex Fluids). Foi um período esclarecedor para minha vida e experiência acadêmica.

Agradeço sempre aos meus professores Walter Cárdenas e Guzmán Chamilco, da graduação em matemática, por reconhecer meu potencial acadêmico e me incentivar no caminho da pesquisa científica.

Agradeço as inúmeras amigas que iniciaram e se fortaleceram em Porto Alegre e demais cantos do Rio Grande do Sul. Amigos que ficarão marcados na minha vida por todo o companheirismo, paciência e conversas que me transformaram em uma pessoa melhor para a vida e para exercer minha profissão de cientista com todo o empenho que o nosso mundo precisa.

Por fim, agradeço principalmente a toda minha família (irmãos, primos, tios, avós e etc.) por todo incentivo sempre. Em especial aos meus pais Áurea e Geraldo que, apesar da distância, sempre estiveram ao meu lado e sempre acreditaram no meu potencial nessa jornada tão longe de casa. Todo o suporte e carinho são sempre os principais combustíveis para escapar das dificuldades que surgem nas etapas da vida.

RESUMO

Neste trabalho é apresentado a modelagem mecânica e numérica de um escoamento elasto-viscoplástico tixotrópico, em termos dos campos de velocidade, pressão, tensão e parâmetro de estrutura. A discretização numérica é feita pelo Método de Elementos Finitos Estabilizado, também conhecido como Galerkin Mínimos Quadrados (GMQ), através de elementos quadrangulares bilineares. O clássico problema da cavidade é utilizado nas simulações, a fim de comparar a formulação e o código utilizados com os resultados conhecidos na literatura. Além disso, apresenta-se o estudo de materiais elasto-viscoplástico tixotrópico em uma contração abrupta na escala 4:1, utilizando a formulação descrita e uma nova função viscosidade para fluidos viscoplásticos, denominada função Viscoplastica Harmônica (VPH). Resultados envolvendo a função VPH são introduzidos e discutidos pela primeira vez nesta tese e apresenta um ótimo ajuste de curva, quando comparada com outras funções disponíveis na literatura. Além da fácil implementação, essa função também apresenta um platô para as altas e baixas viscosidades que são fisicamente realistas, visto que não é possível uma viscosidade infinita ou nula. O menor tempo computacional é também uma característica perceptível nas simulações usando a nova função viscoplastica, isso é um atributo do seu equacionamento que não depende de um termo exponencial, como outros modelos. O estudo de qualidade de malha também é apresentado a fim de garantir a escolha do domínio discreto adequado. Apesar do uso de elementos de ordem inferior, o método GMQ mostrou-se estável na aproximação numérica de todos os problemas dispostos, garantindo até mesmo a análise sobre os efeitos da cinemática, da elasticidade e da tixotropia no escoamento dos fluidos dentro da contração abrupta.

Palavras-chave: Elasto-viscoplástico; Tixotrópico; Método de Elementos Finitos Estabilizado; Nova Função Viscosidade; Fluidos Viscoplasticos.

ABSTRACT

In this work the mechanical and numerical modeling of a thixotropic elasto-viscoplastic flow in terms of the velocity, pressure, stress and structure parameter is presented. Numerical discretization is done by the Stabilized Finite Element Method, also known as Galerkin Least Squares (GLS), through bilinear quadrangular elements. The classical lid-driven cavity problem is used in the simulations in order to compare the formulation and code used with the results in the literature. In addition, the study of elasto-viscoplastic thixotropic materials in a 4:1 abrupt contraction using the described formulation and a new viscosity function for viscoplastic fluids, called the Harmonic Viscoplastic Function (HVP), is presented. Results involving the HVP function are introduced and discussed for the first time in this thesis and present a better curve fit when compared to other functions available in the literature. Besides to easy implementation, this function also features a plateau for high and low viscosities that are physically realistic, since infinite or zero viscosity is not possible. The shortest computational time is also a perceptible feature in the simulations using the new viscoplastic function, this is an attribute of its equation that does not depend on an exponential term like other models. The mesh quality study is also presented in order to ensure the choice of the appropriate discrete domain. Despite the use of lower-order elements, the GLS method proved to be stable in the numerical approximation of all the problems, guaranteeing even the analysis of the effects of kinematics, elasticity and thixotropy on fluid flow within the abrupt contraction.

Keywords: Elasto-viscoplastic; Thixotropic; Stabilized Finite Element Method; New Viscosity Function; Viscoplastic Fluids.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão Bibliográfica	2
1.2	Objetivos	4
1.3	Organização do Trabalho	5
2	FUNDAMENTAÇÃO MATEMÁTICA	7
2.1	O espaço $L^2(\Omega)$: Energia cinética finita	7
2.2	O espaço $H^1(\Omega)$: Tensão finita	9
2.3	Teoremas	10
3	FLUIDOS NEWTONIANOS GENERALIZADOS	12
3.1	Modelo Power-law	12
3.2	Modelo de Carreau	14
3.3	Modelos de viscoplasticidade	15
3.3.1	Plásticos de Bingham	16
3.3.2	Modelo de Herschel-Bulkley	16
3.3.3	Modelo de Papanastasiou	16
3.4	Nova Função Viscosidade	17
3.5	Tixotropia	20
4	MODELAGEM MECÂNICA	23
4.1	Cinemática dos Fluidos	23
4.2	Equação de Conservação de Massa	24
4.3	Equação da Quantidade de Movimento	25
4.3.1	Pressão	28
4.4	Equações Constitutivas	29
4.4.1	Maxwell Convectado Superior (UCM)	29
4.4.2	Modelo de Oldroyd-B	31
4.4.3	Equação constitutiva para fluidos tixotrópicos	32

4.5	Equação de evolução para o parâmetro de estrutura	33
4.6	Resumo das Equações Fundamentais	34
5	ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES	36
5.1	Parâmetros na Equação da Quantidade de Movimento	36
5.2	Parâmetros para o comportamento reológico	37
5.3	Parâmetros para Função VPH	39
6	DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES	42
6.1	Formulação Variacional	42
6.2	Método de Elementos Finitos	45
6.3	Método de Galerkin Mínimos Quadrados	49
7	RESULTADOS	52
7.1	Verificação do código	52
7.2	Cavidade — Elasto-viscoplástico (EVP)	60
7.3	Contração Abrupta — EVP com Tixotropia	62
7.3.1	Efeito da Cinemática	67
7.3.2	Efeito da Elasticidade	71
7.3.3	Efeito da Tixotropia	74
8	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	78
8.1	Comentários	80
8.2	Perspectivas Futuras	81
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	81
	APÊNDICE A NOMENCLATURAS	85

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Modelos de fluidos Power-Law	13
Figura 3.2	Modelos de fluidos de Carreau.	15
Figura 3.3	Comparaçãõ entre o comportamento do modelos para os campos escalares de (a) Viscosidade e (b) Tensãõ de Cisalhamento	19
Figura 4.1	Representaçãõ esquemática do Modelo de Maxwell	29
Figura 4.2	Representaçãõ esquemática do Modelo de Oldroyd-B	31
Figura 4.3	Representaçãõ esquemática do modelo para fluidos tixotrõpicos	32
Figura 5.1	Representaçãõ das taxas de cisalhamento na funçãõ viscosidade	38
Figura 5.2	Funçãõ viscosidade harmônica adimensional para fluidos viscoplásticos	40
Figura 7.1	Cavidade e suas condições de contorno	53
Figura 7.2	Soluçãõ GLS para $Re = 0$, com 10000 elementos Q_1/Q_1 : (a) Isolinhas do campo de pressãõ, onde as linhas (—) e (- - -) indicam onde a soluçãõ é positiva e negativa, respectivamente; (b) Linhas de corrente.	55
Figura 7.3	Soluçãõ GLS para $Re = 400$, com 10000 elementos Q_1/Q_1 : (a) Isolinhas do campo de pressãõ, onde as linhas (—) e (- - -) indicam onde a soluçãõ é positiva e negativa, respectivamente; (b) Linhas de corrente.	56
Figura 7.4	Soluçãõ GLS para $Re = 1000$, com 10000 elementos Q_1/Q_1 : (a) Isolinhas do campo de pressãõ, onde as linhas (—) e (- - -) indicam onde a soluçãõ é positiva e negativa, respectivamente; (b) Linhas de corrente.	57
Figura 7.5	Perfis de velocidade para $Re = 0$: (a) Velocidade horizontal (em $x_1 = 0,5$); (b) Velocidade vertical (em $x_2 = 0,5$)	58
Figura 7.6	Perfis de velocidade para $Re = 400$: (a) Velocidade horizontal (em $x_1 = 0,5$); (b) Velocidade vertical (em $x_2 = 0,5$)	59
Figura 7.7	Perfis de velocidade para $Re = 1000$: (a) Velocidade horizontal (em $x_1 = 0,5$); (b) Velocidade vertical (em $x_2 = 0,5$)	60

Figura 7.8	Malha com 10000 elementos ($Q1/Q1/Q1$).	61
Figura 7.9	Efeito do tempo de relaxação dentro da cavidade: Regiões de λ para $m = 2$, $U^* = 0,05$, $t_{eq}^* = 0$ e (a) $\theta_o^* = 10$; (b) $\theta_o^* = 100$; (c) $\theta_o^* = 1000$	62
Figura 7.10	Geometria e condições de contorno da contração abrupta.	63
Figura 7.11	Malha com 10000 elementos bilineares	64
Figura 7.12	Qualidade de Malha	64
Figura 7.13	Perfil de λ longitudinal em $x_2^* = 0$	65
Figura 7.14	Linhas de Corrente para o caso base.	66
Figura 7.15	Queda da Pressão	67
Figura 7.16	Efeito da cinemática em λ para $\theta_o^* = 100$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $U^* = 0,1$; (b) $U^* = 0,25$; (c) $U^* = 0,5$; (d) $U^* = 1$; (e) $U^* = 1,5$ e (f) $U^* = 2$	68
Figura 7.17	Efeito da cinemática nas regiões aparentemente não-escoadas para $\theta_o^* = 100$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $U^* = 0,1$; (b) $U^* = 0,25$; (c) $U^* = 0,5$; (d) $U^* = 1$; (e) $U^* = 1,5$ e (f) $U^* = 2$	69
Figura 7.18	Perfis transversais de deformação elástica, em $x_1^* = -24$, para $\theta_o^* = 100$ e $t_{eq}^* = 1$ obtidos pela variação de U^*	70
Figura 7.19	Deformação elástica para $\theta_o^* = 100$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $U^* = 0,1$; (b) $U^* = 0,25$; (c) $U^* = 0,5$; (d) $U^* = 1$; (e) $U^* = 1,5$ e (f) $U^* = 2$	71
Figura 7.20	Efeito da elasticidade em λ para $U^* = 0,25$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $\theta_o^* = 0,1$; (b) $\theta_o^* = 1000$; (c) $\theta_o^* = 1111$; (d) $\theta_o^* = 1250$; (e) $\theta_o^* = 1429$; (f) $\theta_o^* = 1667$	72
Figura 7.21	Efeito da elasticidade nas regiões aparentemente não-escoadas para $U^* = 0,25$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $\theta_o^* = 0,1$; (b) $\theta_o^* = 1000$; (c) $\theta_o^* = 1111$; (d) $\theta_o^* = 1250$; (e) $\theta_o^* = 1429$; (f) $\theta_o^* = 1667$	73
Figura 7.22	Deformação elástica para $U^* = 0,25$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $\theta_o^* = 0,1$; (b) $\theta_o^* = 1000$; (c) $\theta_o^* = 1111$; (d) $\theta_o^* = 1250$; (e) $\theta_o^* = 1429$; (f) $\theta_o^* = 1667$	74

Figura 7.23 Efeito da tixotropia em λ para $U^* = 0,25$ e $\theta_o^* = 100$: (a) $t_{eq}^* = 0,1$; (b) $t_{eq}^* = 1$; (c) $t_{eq}^* = 2,5$; (d) $t_{eq}^* = 5$; (e) $t_{eq}^* = 10$ e (f) $t_{eq}^* = 17$ 75

Figura 7.24 Efeito da tixotropia nas regiões aparentemente não-escoadas para $U^* = 0,25$ e $\theta_o^* = 100$: (a) $t_{eq}^* = 0,1$; (b) $t_{eq}^* = 1$; (c) $t_{eq}^* = 2,5$; (d) $t_{eq}^* = 5$; (e) $t_{eq}^* = 10$ e (f) $t_{eq}^* = 17$ 76

Figura 7.25 Deformação elástica para $U^* = 0,25$ e $\theta_o^* = 100$: (a) $t_{eq}^* = 0,1$; (b) $t_{eq}^* = 1$; (c) $t_{eq}^* = 2,5$; (d) $t_{eq}^* = 5$; (e) $t_{eq}^* = 10$ e (f) $t_{eq}^* = 17$. . . 77

LISTA DE TABELAS

Tabela 7.1	Convergência de malha	65
------------	---------------------------------	----

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CF2	Complex Flows of Complex Fluids
CHBe	Department of Chemical and Biomolecular Engineering
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
DEM	Departamento de Engenharia Mecânica
DEQUI	Departamento de Engenharia Química
EUA	Estados Unidos da América
EVP	Elasto-viscoplástico
GLS	Galerkin Least Square
GReo	Grupo de Reologia
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
LAMAC	Laboratório de Mecânica dos Fluidos Aplicada e Computacional
LBB	Ladyszhenkaya-Babuška-Brezzi
PPGEM	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
PPGMAP	Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada
PROMECA	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
PUC	Pontifícia Universidade Católica
RJ	Rio de Janeiro
RS	Rio Grande do Sul
UCM	Upper-convected Maxwell
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
UNISINOS	Universidade do Vale do Rio dos Sinos

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A	Tensor genérico
a	Vetor genérico
B	Operador bilinear
$C^1(\Omega)$	Espaço de funções com primeira derivada contínua
$C^2(\Omega)$	Espaço de funções com segunda derivada contínua
d	Número de dimensões espaciais
D	Tensor taxa de deformação, s^{-1}
\mathfrak{F}	Função genérica de valor escalar ou vetorial
$f(\tau)$	Função associada ao termo de quebra da microestrutura, s
g	Aceleração da gravidade, m/s^2
g	Módulo da aceleração da gravidade, m/s^2
G	Módulo de elasticidade, N/m^2
\mathcal{G}	Funcional linear
Ga	Número de Galilei
h_K	Comprimento de malha, m
$H^1(\Omega)$	Espaço de Sobolev de funções com derivadas em $L^2(\Omega)$
$H_0^1(\Omega)$	Espaço de funções $H^1(\Omega)$ com contorno nulo
I	Tensor identidade
K	Índice de consistência, $Pa \cdot s^n$
L	Comprimento característico, m
$L^2(\Omega)$	Espaço de funções mensuráveis com quadrado integrável
$L_0^2(\Omega)$	Espaço de funções $L^2(\Omega)$ com média nula
m	Constante adimensional positiva
m	Massa, kg
n	Índice de escoamento
n	Vetor normal
p	Pressão, Pa
P	Pressão modificada, Pa
Q	Espaço funcional do campo de pressão

Q_1	Elemento quadrangular bilinear
q	Função teste do campo de pressão
\mathbb{R}	Espaço de números reais
Re	Número de Reynolds
Re_K	Número de Reynolds de malha
\mathbf{S}	Função teste do campo de tensão
\mathbf{T}	Tensor tensão total, N/m ²
t	Tempo, s
t_c	Tempo característico, s
t_{eq}	Tempo de equilíbrio, s
\mathbf{u}	Campo de velocidade admissível, m/s
U	Velocidade característica, m/s
\mathbf{V}	Espaço funcional do campo de velocidade
\mathbf{v}	Função teste do campo de velocidade
x_i	Componentes do vetor \mathbf{x} , m
\mathbf{x}	Vetor de coordenadas espaciais de uma partícula, m

Símbolos Gregos

α	Parâmetro de estabilização da equação da quantidade de movimento
β	Parâmetro de estabilização da equação constitutiva
γ	Deformação total
γ_e	Deformação elástica
γ_v	Deformação viscosa
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação por cisalhamento, s ⁻¹
$\dot{\gamma}_c$	Taxa de deformação característica, s ⁻¹
$\dot{\gamma}_e$	Taxa de deformação elástica, s ⁻¹
$\dot{\gamma}_v$	Taxa de deformação viscosa, s ⁻¹
$\dot{\gamma}_0$	Taxa de deformação do material completamente estruturado, s ⁻¹
$\dot{\gamma}_1$	Taxa de deformação na região power-law, s ⁻¹
Γ	Contorno do domínio Ω
δ	Parâmetro de estabilização da equação da continuidade
ϵ	Parâmetro de estabilização do método da penalidade
λ	Parâmetro de estruturação

λ_{eq}	Parâmetro de estruturação em estado de equilíbrio
μ_p	Viscosidade plástica, kg/m·s
η	Viscosidade aparente, kg/m·s
η_c	Viscosidade característica, kg/m·s
η_s	Viscosidade do solvente, kg/m·s
η_t	Viscosidade total, kg/m·s
η_p	Viscosidade do polímero, kg/m·s
η_{eq}	Viscosidade em estado de equilíbrio, kg/m·s
η_v	Viscosidade estrutural, kg/m·s
η_0	Viscosidade do material completamente estruturado, kg/m·s
η_∞	Viscosidade do material completamente não-estruturado, kg/m·s
θ	Tempo de relaxação, s
Λ	Espaço funcional do parâmetro de estruturação
ξ	Função teste do parâmetro de estruturação
Ξ	Função base para o parâmetro de estruturação
$\mathbf{\Xi}$	Vetor de funções base para o parâmetro de estruturação
Π	Função base para o campo de tensão
$\mathbf{\Pi}$	Vetor de funções base para o campo de tensão
ρ	Massa específica, kg/m ³
Σ	Espaço funcional do campo de tensão
τ	Tensão de cisalhamento, N/m ²
τ_0	Tensão limite de escoamento (yield stress), N/m ²
τ_c	Tensão de cisalhamento característica, N/m ²
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor extra de tensão, N/m ²
Φ	Função base para o campo de velocidade
$\mathbf{\Phi}$	Vetor de funções base para o campo de velocidade
ψ	Linhas de corrente
Ψ	Função base para o campo de pressão
$\mathbf{\Psi}$	Vetor de funções base para o campo de pressão
ω	Parâmetro de estabilização da equação de evolução
Ω	Domínio do problema

Sobrescritos

$*$	Adimensional
T	Transposto
h	Espaço ou função discreta
∇	Derivada convectada superior
Δ	Derivada convectada inferior

Símbolos Matemáticos

\subset	Subconjunto
\times	Produto cartesiano
∇	Operador gradiente
div	Operador divergente
\cdot	Produto interno de vetores
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Produto interno de funções
$\ \cdot\ _0$	Norma $L^2(\Omega)$
$\ \cdot\ _1$	Norma $H^1(\Omega)$
$:$	Contração de tensores
tr	Operador traço

1 INTRODUÇÃO

Um fluido não newtoniano é caracterizado pela relação não linear existente entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação. Em outras palavras, esses fluidos possuem viscosidade não constante. Essas características são evidentes em uma larga variedade de fluidos industriais, o que torna atrativo o estudo desses materiais para indústrias de petróleo, cosméticos, farmacêuticas, indústrias alimentícias e entre outras.

Existem inúmeros modelos que buscam representar o comportamento de fluidos não newtonianos, e.g. [Waele, 1923; Carreau, 1972]. Dentre eles, os modelos de viscoplasticidade — que preveem tensão limite de escoamento (ou *yield stress*) [Barnes, 1999]. Devido a essa característica, o escoamento desses tipos fluidos exhibe regiões aparentemente não-escoadas, onde o nível de tensão é menor do que a tensão limite de escoamento.

Já os fluidos viscoelásticos são uma classe de materiais que, ao deformarem-se, sofrem simultaneamente deformações elásticas e viscosas. Deformações elásticas são deformações reversíveis sofridas por um corpo sob tensão. Ao cessar a tensão o corpo retorna à sua forma original. A energia de deformação é recuperada quando a tensão aplicada ao material cessa. É o comportamento típico de muitos sólidos. Por outro lado, deformações viscosas são deformações contínuas e irreversíveis sofridas pelo material enquanto submetido a uma tensão de cisalhamento [Machado, 2002]. A propriedade que relaciona a taxa de deformação do corpo ao cisalhamento é a viscosidade. Um material viscoso ideal não é capaz de sustentar uma tensão, dissipando a energia de deformação sob a forma de calor, como é o caso de muitos fluidos. Alguns modelos clássicos que descrevem o comportamento viscoelástico são os modelos de Maxwell e Oldroyd-B [Oldroyd, 1950]. Dentre os fluidos viscoelásticos, os polímeros são materiais que apresentam comportamento viscoelástico com ampla utilização: plásticos, tinta e fluido de perfuração na indústria do petróleo. Alguns sólidos como borrachas, silicone e argilas também apresentam este comportamento.

Fluidos estruturados também possuem comportamento não newtoniano. Nos menores níveis de tensão, sua microestrutura frequentemente apresenta comportamento elástico. Nesse caso, ao ultrapassar uma certa tensão limite de escoamento, a microestrutura entra em colapso diminuindo a viscosidade e a elasticidade drasticamente. Quando submetida a um nível de tensão constante, por um período de tempo suficientemente longo,

a microestrutura do fluido adquire uma configuração estável, que é resultado do equilíbrio entre as taxas de quebra e construção. Se a mudança na microestrutura não ocorre instantaneamente após a mudança de tensão, a estrutura do fluido é dita ser dependente do tempo. Um fluido com estrutura dependente do tempo é dito *Tixotrópico* se sua viscosidade diminui/aumenta com o tempo à medida que sofre de um aumento/diminuição na taxa de cisalhamento, e se além disso essas alterações na viscosidade são reversíveis. Por outro lado, um fluido com estrutura dependente do tempo é dito *Anti-tixotrópico* se sua viscosidade aumenta/diminui com o tempo à medida que a tensão de cisalhamento aumenta/diminui, e se além disso essas alterações na viscosidade são reversíveis.

O estudo numérico apresentado nesta tese é realizado a fim de investigar o comportamento dos fluidos elasto-viscoplásticos tixotrópicos em uma geometria que simula a redução de diâmetro em uma tubulação — contração abrupta. Esse tipo de escoamento é relevante no âmbito industrial visto que a variação de diâmetro é recorrente em tubulações industriais. Desse modo, elaborou-se um estudo preliminar para entender a influência dos principais parâmetros no comportamento do escoamento.

1.1 Revisão Bibliográfica

No trabalho de Bingham, 1922, a tensão de cisalhamento já era definida incluindo a tensão limite de escoamento, porém o modelo apresentado não era contínuo. Já o trabalho de Bird, 1982, apresenta uma versão generalizada, em que a relação entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação não é linear, mas ainda com um modelo descontínuo.

Um trabalho importante para fluidos viscoplásticos é o de Papanastasiou, 1987, que definiu uma função de viscosidade contínua, introduzindo na formulação um termo exponencial com parâmetros que controlem o seu crescimento nas baixas taxas de cisalhamento. Uma alternativa a essa função é apresentada por De Souza Mendes e Dutra, 2004, que apresentam um modelo no qual os parâmetros dependem da reologia do material e que possui um limite superior, fisicamente realista, para a função viscosidade.

O termo "tixotropia" foi introduzido por Freundlich, 1928, baseado a sugestão de Péterfi, 1927, que constatou que o protoplasma celular poderia ser liquefeito por ação mecânica. O nome vem da combinação das palavras gregas $\thetaίξις$ (thixis: mexer, agitar) e $τρέπω$ (trepō: transformação, alteração).

A maioria dos alimentos que possuem comportamento tixotrópico são sistemas he-

terogêneos contendo uma fase dispersa que é geralmente muito fina. Quando em repouso, as partículas ou moléculas no alimento estão ligadas entre si por forças fracas. Quando as forças de cisalhamento são suficientemente altas as ligações entre partículas é quebrada resultando na redução do tamanho das unidades estruturais, que por sua vez oferecem menor resistência ao escoamento durante o cisalhamento. Esse tipo de comportamento é comum em alimentos como molho de salada e queijos cremosos onde os ajustes estruturais ocorrem no alimento devido ao cisalhamento, até se atingir um equilíbrio [Rao, 2010].

As alterações na microestrutura levando em conta a tixotropia são altamente complexas e ainda insuficientemente compreendidas. Apesar disso, os fenômenos com tixotropia são frequentes nas atividades industriais, incluindo o processamento mineral, metais, produtos alimentícios e farmacêuticos, cerâmicas, ou na utilização como tintas e revestimentos, géis, corantes, lamas de perfuração, concreto, etc. De fato, uma dependência temporal específica para a viscosidade é um objetivo importante na formulação de um produto. Em alguns casos, deseja-se uma escala temporal tixotrópica em particular, em outros busca-se acelerar o tempo de evolução para alcançar uma rápida recuperação da viscosidade, quando possível, após um rápido decrescimento da taxa de deformação ou da tensão cisalhante. Com o interesse em abordar os diferentes conceitos de tixotropia, a relação entre esse comportamento e outras classes de materiais reológicos, assim como os modelos que são usados para descrevê-la, Mewis e Wagner, 2009, fazem uma revisão cuidadosa levando em conta todos esses aspectos. Já o trabalho de Barnes, 1997, faz um apanhado histórico da tixotropia junto com uma descrição de como ela é entendida pela comunidade científica na atualidade. Além de incluir uma série de aplicações onde a tixotropia é importante, também são listados diferentes tipos de sistemas tixotrópicos e vários outros de teorias que tem sido propostas para descrever o fenômeno matematicamente.

Para a aproximação numérica, a obtenção da formulação variacional (ou formulação fraca) de um problema governado por equações diferenciais (formulação forte) é o ponto de partida para o Método de Galerkin, que consiste na forma discreta da formulação fraca. A discretização das variáveis primais é feita pela combinação linear de funções testes e no caso em que essas funções testes são polinômios a formulação é conhecida como Método de Elementos Finitos. Esse método surgiu com aplicações na engenharia aeronáutica e civil, e com o passar do anos tem sido amplamente usado para a solução de escoamentos em mecânica dos fluidos. A formulação variacional de problemas envolvendo dois campos

ou mais são referidas como formulação variacional mista.

Uma das vantagens de uma formulação variacional mista é que a variável primal (e.g. velocidade para o escoamento de Stokes) faz parte de um espaço maior de funções, no qual é mais fácil obter soluções (e.g. $H^1(\Omega)^d$). No entanto, a aproximação de formulações mistas usando o clássico método de elementos finitos (ou Galerkin, de modo geral) é mal sucedida para combinações arbitrárias de interpoladores. Nesse contexto, condições para formulações mistas foram estabelecidas por Babuška, 1971, e Brezzi, 1974, que no contexto de fluidos incompressíveis é definida como Condição LBB (Ladyszhenkaya-Babuška-Brezzi) [Oden, 1982]. A fim de contornar a limitação da condição LBB, várias formulações do tipo Galerkin Mínimos Quadrados são encontradas na literatura [Franca e Hughes, 1988; Franca e Frey, 1992]. Essas formulações envolvem a imposição de termos adicionais na formulação clássica multiplicados por coeficientes [Harari e Hughes, 1992], geralmente dependentes do elemento de malha, tornando possível o uso de uma quantidade maior de interpoladores, incluindo os de ordem inferior, para a aproximação da formulação variacional. Como consequência é possível realizar implementações de código mais rápidas, definindo um único interpolador, e obter uma drástica redução do tempo computacional no cálculo de problemas.

Os materiais que apresentam tanto comportamento viscoplástico, quanto viscoelástico são apresentados como materiais elasto-viscoplásticos. Desse modo, o estudo do escoamentos de fluidos elasto-viscoplásticos tixotrópicos é exposto neste trabalho. São propostos o estudo do comportamento deste modelo em uma contração abrupta, além da análise de uma nova viscosidade viscoplástica. Os conceitos necessários para a modelagem mecânica e numérica do problema são explicitados, e simulações numéricas são realizadas comparando resultados com a literatura. Todo o processo de modelagem e simulação numérica serão descritos nos capítulos seguintes.

1.2 Objetivos

O principal objetivo desta pesquisa é simular o escoamento de fluidos elasto-viscoplásticos tixotrópicos em uma contração planar abrupta com razão de aspecto de 4:1 fixa. Os objetivos específicos são resumidos abaixo:

- a) Utilizar uma nova função viscoplástica na simulação de escoamentos de fluidos elasto-viscoplásticos tixotrópicos.

- b) Avaliar a influência da intensidade de escoamento, elasticidade e tixotropia na contração abrupta.

1.3 Organização do Trabalho

Para um melhor entendimento desta tese, uma breve descrição dos capítulos é apresentada a seguir.

No capítulo 2, alguns conceitos matemáticos fundamentais são introduzidos para o entendimento dos espaços de funções, produto interno e norma. Além de teoremas essenciais tanto para realizar a modelagem mecânica, quanto para determinar a forma das formulações variacionais e, conseqüentemente, o método de elementos finitos.

No capítulo 3, as definições de fluido generalizado são apresentadas, destacando alguns dos principais modelos. Os modelos de viscoplasticidade também são definidos, inclusive fazendo comparações entre suas características. Além disso, a noção de tixotropia é introduzida, destacando fluidos que apresentam esse comportamento e as diferentes aproximações para modelos tixotrópicos que já foram propostas na literatura.

No capítulo 4, a modelagem mecânica das equações que governam escoamentos elasto-viscoplásticos é formulada, incluindo até o comportamento tixotrópico. A modelagem das equações inclui as definições de cinemática de fluidos, assim como a dedução das equações de conservação da massa, equação da quantidade de movimento e dois tipos de equações constitutivas para comportamento viscoelástico, na qual a segunda também inclui a modelagem para o comportamento tixotrópico. Além disso, uma equação de evolução para descrever o comportamento do parâmetro de estrutura é apresentada. Ao final do capítulo apresenta-se um resumo das equações obtidas.

No capítulo 5, os parâmetros necessários para a adimensionalização das equações que modelam o escoamento de fluidos tixotrópico são definidos. A adimensionalização da equação da quantidade de movimento é utilizada como referência para a obtenção da forma adimensional, assim como comparação entre forma adimensional clássica e as formas adimensionais que utilizam parâmetros reológicos.

No capítulo 6, o processo de discretização das equações que modelam um problema elasto-viscoplástico tixotrópico é cuidadosamente trabalhado, de modo a reinserir as definições de espaço de funções, como ferramenta para a obtenção da formulação variacional contínua do problema. Para isso, partindo do problema forte, todos os termos que inte-

gram o problema variacional são calculados. Partindo da formulação variacional contínua, finalmente é empregado o método de elementos finitos para a discretização do problema, onde são definidas as funções discretas através da combinação linear de funções teste. Com isso, o sistema matricial é montado de modo que sua solução é obtida para os graus de liberdade do problema. Com o problema matricial definido, ainda é apresentado o método de mínimos quadrados, que serve para estabilizar a formulação clássica, quando essa utiliza polinômios interpoladores de mesma ordem para as diferentes variáveis primais.

No capítulo 7, os principais resultados da tese são apresentados. Um problema newtoniano é resolvido e comparado com a literatura como forma de validar o código utilizado e apresenta-se também a solução de um problema elasto-viscoplástico que inspirou a abordagem numérica adotada neste trabalho. Os resultados obtidos da simulação de fluidos elasto-viscoplásticos tixotrópicos em uma contração abrupta é abordado em seguida, analisando suas principais características.

No capítulo 8, as conclusões e perspectivas de trabalhos futuros são apresentados.

2 FUNDAMENTAÇÃO MATEMÁTICA

Neste capítulo introduz-se algumas definições e teoremas importantes para construção e entendimento da estrutura do trabalho. Essas elucidações são essenciais para a fundamentação das equações empregadas na modelagem, assim como dos métodos numéricos.

2.1 O espaço $L^2(\Omega)$: Energia cinética finita

Considere $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ (ou \mathbb{R}^3) um domínio (aberto e limitado) com contorno suficientemente suave Γ em \mathbb{R} (ou \mathbb{R}^2). O espaço de funções que é essencial para a mecânica de fluidos é espaço de Hilbert $L^2(\Omega)$.

Definição 2.1 (Espaço $L^2(\Omega)$). O espaço $L^2(\Omega)$ denota o conjunto de *todas* as funções $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ com

$$\int_{\Omega} |p|^2 < \infty, \quad (2.1)$$

ou seja, espaço de funções de quadrado integrável finito.

A palavra "*todas*" na Definição 2.1 significa todas as funções mensuráveis no sentido de *Lebesgue* [Rudin, 1987]. Para entender sua importância, suponha um fluido com massa específica constante ρ_0 e velocidade u escoando em um domínio Ω . Nessa configuração a energia cinética ($\frac{1}{2}$ massa \times velocidade²) é dada

$$\text{Energia cinética} := \frac{1}{2} \rho_0 \int_{\Omega} |u|^2 d\Omega. \quad (2.2)$$

Assim, o espaço $L^2(\Omega)$ pode ser visto como o espaço de todas as velocidades com energia cinética total finita.

O espaço $L^2(\Omega)$ é um espaço de Hilbert, i.e., um espaço completo, linear e com norma induzida pelo seu produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, dado por

$$\langle p, q \rangle = \int_{\Omega} p(x)q(x)d\Omega, \quad \text{para } p, q : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ e } p, q \in L^2(\Omega) \quad (2.3)$$

e norma L^2 , dada por

$$\|p\|_0 = \left[\int_{\Omega} p(x)p(x) d\Omega \right]^{1/2} = \langle p, p \rangle^{1/2} \quad (2.4)$$

No decorrer deste trabalho, a notação $\|\cdot\|_0$ será usada para a norma de $L^2(\Omega)$. Será também adotado $L^2(\Omega)^d = L^2(\Omega) \times \cdots \times L^2(\Omega)$, d vezes, para funções de valor vetorial e $L^2(\Omega)^{d \times d}$ para funções de valor matricial (tensores), onde d é o número de dimensões espaciais.

Definição 2.2. Considere $L^2(\Omega)^d = \{\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_d) | \Omega \rightarrow \mathbb{R} : \forall w_j \in L^2(\Omega), j = 1, \dots, d\}$, então

$$\|\mathbf{w}\|_0 := [\|w_1\|_0^2 + \cdots + \|w_d\|_0^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.5)$$

É necessário também definir o espaço de funções de valor matricial, como é o caso dos tensores.

Definição 2.3. Para $L^2(\Omega)^{d \times d} = \{\mathbf{T} = (\mathbf{T})_{ij}, i, j = 1, \dots, d : \mathbf{T}_{ij} \in L^2(\Omega)\}$, i.e. $\|\mathbf{T}\|_0 < \infty$, tem-se

$$\|\mathbf{T}\|_0 = \left[\sum_{i,j=1}^d \|\mathbf{T}_{ij}\|_0^2 \right]^{1/2}. \quad (2.6)$$

Novamente, o produto interno para os espaços de funções de valor vetorial e matricial são dados respectivamente por

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d u_i v_i d\Omega, \quad \text{para } \mathbf{u}, \mathbf{v} \in L^2(\Omega)^d, \quad (2.7)$$

$$\langle \mathbf{S}, \mathbf{T} \rangle = \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^d \mathbf{S}_{ij} \mathbf{T}_{ij} d\Omega, \quad \text{para } \mathbf{S}, \mathbf{T} \in L^2(\Omega)^{d \times d}. \quad (2.8)$$

Definição 2.4. Considere Ω um domínio aberto e limitado. Então $L_0^2(\Omega) \subset L^2(\Omega)$ é definido por

$$L_0^2(\Omega) = \left\{ q : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} q d\Omega = 0, q \in L^2(\Omega) \right\}. \quad (2.9)$$

O espaço $L_0^2(\Omega)$ também é um espaço de Hilbert sob a norma e produto interno de $L^2(\Omega)$. Esse espaço é muito utilizado na formulação variacional de problemas de Stokes e Navier-Stokes, onde o campo de pressão precisa ser normalizado de alguma maneira, como será visto mais adiante, e o melhor modo de fazer isso matematicamente é impondo $\int_{\Omega} p d\Omega = 0$ [Layton, 2008, pg. 54].

2.2 O espaço $H^1(\Omega)$: Tensão finita

Os complexos padrões formados no escoamento de fluidos não são causados apenas por altas velocidades, mas também, por exemplo, pela variação local na velocidade, i.e., o gradiente de velocidade. As variações locais de velocidade são uma das causas pela qual uma camada de fluido exerce força ou arrasto sobre a camada de fluido adjacente.

Definição 2.5. Considere um domínio Ω de dimensão $d = 2$ ou 3 . Se $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^d$, então $\nabla \mathbf{u}$ é a matriz $d \times d$ de todas as possíveis derivadas de \mathbf{u} , onde as componentes são

$$(\nabla \mathbf{u})_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \quad i, j = 1, \dots, d \quad \text{e} \quad \|\nabla \mathbf{u}\|_0^2 = \sum_{i,j=1}^d \left\| \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\|_0^2. \quad (2.10)$$

Além disso, o tensor deformação $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ é a parte simétrica de $\nabla \mathbf{u}$, dado por

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T]. \quad (2.11)$$

Definição 2.6 (Espaço $H^1(\Omega)$). Para um domínio Ω , o espaço $H^1(\Omega)$ é definido como

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) \mid \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), \quad i = 1, \dots, d \right\}. \quad (2.12)$$

O produto interno e norma são respectivamente

$$\langle v, w \rangle_{H^1(\Omega)} = \langle v, w \rangle + \langle \nabla v, \nabla w \rangle, \quad (2.13)$$

$$\|v\|_1 = [\|v\|_0^2 + \|\nabla v\|_0^2]^{1/2}. \quad (2.14)$$

Definição 2.7 (Espaço $H_0^1(\Omega)$). Para um domínio aberto e limitado Ω com contorno Γ , o espaço $H_0^1(\Omega)$ é definido como

$$H_0^1(\Omega) = \{ v \in H^1(\Omega) \mid v = 0 \text{ em } \Gamma \}. \quad (2.15)$$

Em geral, o espaço $H_0^1(\Omega)$ é usado na formulação matemática de problemas que exigem velocidade nula na condição de contorno. Essa condição é conhecida como condição de não-deslizamento (*no-slip condition*, em inglês) e é a condição apropriada para casos onde o contorno físico está fixo, como paredes sólidas que não estão se movendo.

Para o caso onde se trabalha com funções de valor vetorial, como por exemplo a velocidade \mathbf{u} , pode-se adotar a definição do espaço $H^1(\Omega)^d = H^1(\Omega) \times \dots \times H^1(\Omega)$, d vezes, como mostrado a seguir.

Definição 2.8. Para um domínio Ω de dimensão d , espaço $H^1(\Omega)^d$ é definido como

$$H^1(\Omega)^d = \{\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d \mid \mathbf{u} \in L^2(\Omega)^d \text{ e } \nabla \mathbf{u} \in L^2(\Omega)^{d \times d}\}. \quad (2.16)$$

O produto interno e norma são respectivamente

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_{H^1(\Omega)} = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle + \langle \nabla \mathbf{u}, \nabla \mathbf{v} \rangle, \quad (2.17)$$

$$\|\mathbf{u}\|_1 = [\|\mathbf{u}\|_0^2 + \|\nabla \mathbf{u}\|_0^2]^{1/2}. \quad (2.18)$$

Pela definição acima entende-se o motivo desse espaço ser tratado como espaço de tensão finita, pois se uma função de valor vetorial $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^d$ pertence à $H^1(\Omega)^d$, então é necessário que tanto a própria função quanto seu gradiente, que é tensorial, tenham quadrado integrável finito.

2.3 Teoremas

Para $\mathfrak{F}(\mathbf{x}, t)$ uma função de valor escalar (ou vetorial) e $\Omega = \Omega(t)$ um volume fechado e arbitrário de fluido. Temos que

$$F(t) = \int_{\Omega} \mathfrak{F}(\mathbf{x}, t) d\Omega \quad (2.19)$$

é uma função de t que pode ser calculada. Para calcular a derivada material dF/dt , da equação anterior, é necessário um cuidado especial, pois o volume Ω varia com o tempo. Para esse caso, aplica-se o *Teorema de Transporte de Reynolds* enunciado a seguir.

Teorema 2.1 (Reynolds). *Considere $\mathfrak{F} = \mathfrak{F}(\mathbf{x}, t)$ uma função suficientemente regular, então para qualquer volume Ω e tempo t ,*

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathfrak{F} d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathfrak{F} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma, \quad (2.20)$$

onde \mathbf{n} é a normal exterior, \mathbf{u} é velocidade da partícula e Γ é a fronteira de Ω .

Demonstração. Ver Aris, 1990, Pg. 85. □

O Teorema do Transporte de Reynolds estabelece uma relação geral entre a taxa de variação de qualquer propriedade arbitrária, de um sistema e variações no tempo dessa propriedade associadas com o volume de controle. Na Eq. (2.20), o primeiro termo, do lado esquerdo da igualdade, é a taxa de mudança total de uma propriedade extensiva

arbitrária do sistema; o primeiro termo, do lado direito da igualdade, é a taxa de mudança no tempo da propriedade extensiva arbitrária, dentro do volume de controle; enquanto que o último termo é o fluxo total da propriedade através da superfície de controle. Esse teorema foi deduzido no instante quando o sistema e o volume de controle coincidem; isto é verdade desde que $\Delta t \rightarrow 0$, quando o sistema e o volume de controle ocupam o mesmo volume e tem as mesmas fronteiras.

Teorema 2.2 (Teorema da Divergência). *Considere $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ com contorno Γ . Então,*

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{a}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} d\Gamma, \quad (2.21)$$

onde $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$ é uma função de valor vetorial continuamente diferenciável definida sobre Ω ,

$$\operatorname{div}(\mathbf{a}) = \frac{\partial a_1}{\partial x_1} + \frac{\partial a_2}{\partial x_2}$$

e $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ é a normal exterior unitária à Γ .

O Teorema da Divergência é um resultado que relaciona fluxo de um campo vetorial através de uma superfície com o comportamento do campo vetorial dentro da superfície. Mais precisamente, o teorema da divergência diz que o fluxo externo de um campo vetorial que passa através de uma superfície fechada é igual a integral do volume da divergência sobre a região dentro da superfície. Intuitivamente, ela considera que a soma de todas as fontes menos a soma de todos sumidouros dá o valor do fluxo líquido saindo da região.

3 FLUIDOS NEWTONIANOS GENERALIZADOS

Os fluidos newtonianos generalizados são modelados com as mesmas equações dos fluidos newtonianos, porém a viscosidade depende da *taxa de deformação (ou taxa de cisalhamento)* $\dot{\gamma} = \sqrt{2\mathbf{D}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}(\mathbf{u})}$, onde $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ é o tensor taxa de deformação. Como em fluidos Newtonianos, a tensão depende apenas do escoamento instantâneo e não de todo o histórico do escoamento. O modelo para Fluido Newtoniano Generalizado pode ser escrito na forma:

$$\boldsymbol{\tau} = -p\mathbf{I} + 2\eta(\dot{\gamma})\mathbf{D}(\mathbf{u}), \quad (3.1)$$

onde $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor tensão de Cauchy, p é a pressão, \mathbf{I} é o tensor identidade, η é a viscosidade. Esse modelo inclui os fluidos Newtonianos como um caso particular quando $\eta =$ constante, e fluidos não Newtoniano nos demais casos. Os modelos Newtonianos generalizados foram desenvolvidos para se ajustar os dados experimentais de viscosidade variável em medições com diferentes taxas de cisalhamento e a viscosidade $\eta(\dot{\gamma})$ é usualmente obtida empiricamente.

3.1 Modelo Power-law

O modelo Power-law é um exemplo de um dos mais simples fluidos newtonianos generalizados [Waele, 1923]. Ele é particularmente popular por causa do número de soluções exatas que são obtidas para esse modelo. O tensor tensão de Cauchy, no modelo Power-law, é definido como

$$\boldsymbol{\tau} = -p\mathbf{I} + 2K\dot{\gamma}^{n-1}\mathbf{D}(\mathbf{u}), \quad (3.2)$$

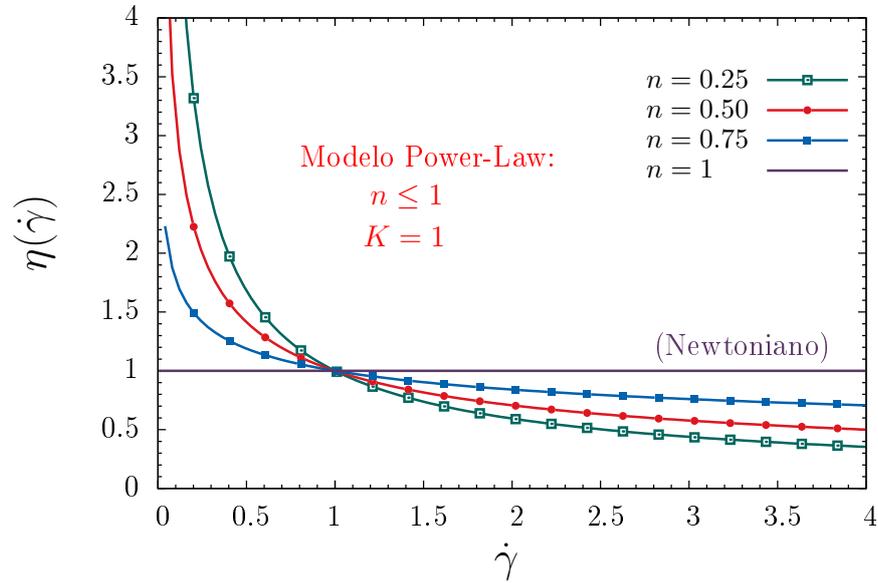
e portanto, $\eta(\dot{\gamma})$ é definido como

$$\eta(\dot{\gamma}) = K\dot{\gamma}^{n-1}, \quad (3.3)$$

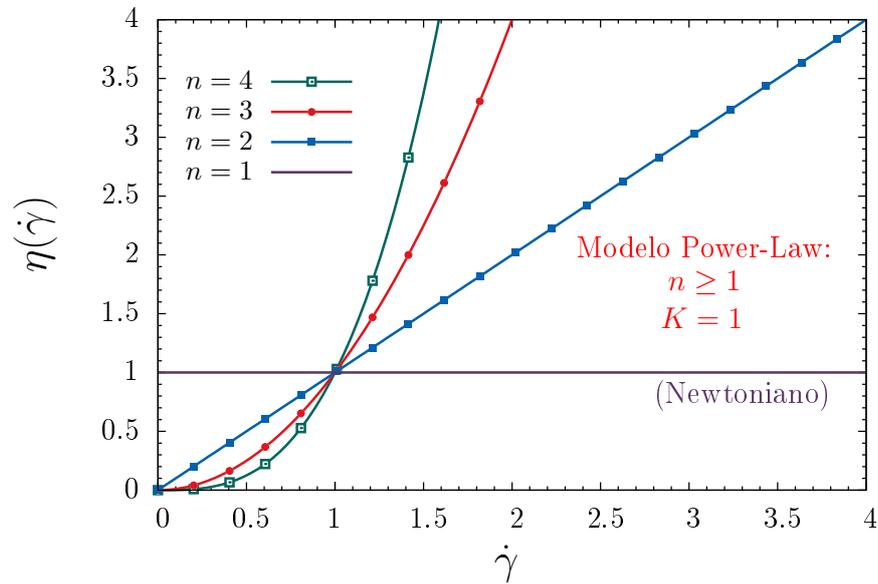
onde n é chamado de índice de escoamento e K é o índice de consistência. Quando n é igual a 1, o modelo Newtoniano é reestabelecido, como pode ser visto na Figura 3.3. Quando n é menor que 1, a equação constitutiva é denominada *pseudoplástica (ou shear-thinning)*, enquanto que n maior que 1 o comportamento é *dilatante (ou shear-thickening)*.

Soluções poliméricas usualmente exibem propriedades *pseudoplástica*, onde a vis-

cosidade reduz quando a taxa de deformação cresce. Já os comportamentos viscosos que incluem o *dilatante* podem ser vistos em suspensões de partículas muito finas.



(a) $n < 1$ (pseudoplástico) e $n = 1$ (Newtoniano)



(b) $n > 1$ (dilatante) e $n = 1$ (Newtoniano)

Figura 3.1 – Modelos de fluidos Power-Law

A viscosidade quando $\dot{\gamma}$ tende à 0 e quando $\dot{\gamma}$ tende ao infinito são

- pseudoplástico ($n < 1$) : $\lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) = \infty, \quad \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \eta(\dot{\gamma}) = 0.$
- dilatante ($n > 1$) : $\lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) = 0, \quad \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \eta(\dot{\gamma}) = \infty.$

(3.4)

Uma função viscosidade que tende ao infinito, quando a taxa de cisalhamento tende à zero, como no caso pseudoplástico (ou ao infinito, no caso dilatante), não condiz com os resultados experimentais e assim limitam a aplicabilidade dos modelos Power-Law, visto que viscosidade infinita não é fisicamente realista.

3.2 Modelo de Carreau

Para representar uma queda abrupta na viscosidade, pode-se empregar o modelo de Carreau [Carreau, 1972], definido como:

$$\frac{\eta - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = \frac{1}{(1 + \lambda^2 \dot{\gamma})^{(1-n)/2}}. \quad (3.5)$$

Esse modelo é usado geralmente na modelagem de fluidos pseudoplásticos, onde incorpora um limite superior para a viscosidade, η_0 , nas baixas taxas de cisalhamento, um limite inferior para a viscosidade, η_{∞} , nas altas taxas de cisalhamento e uma região *power-law* que inicia em $\dot{\gamma}_1 \simeq 1/\lambda$. Além disso, o parâmetro λ tem unidade de tempo e pode ser referido como um tempo constante. Isso não deve ser confundido com tempo de relaxação usado para quantificar memória de fluidos, já que fluidos newtonianos generalizados não podem reproduzir propriedades de modelos elásticos [Brebba, 2013, pg. 139]. A Figura 3.2 exhibe graficamente o comportamento da função viscosidade para fluidos shear thinning governados pelo modelo de Carreau com diferentes valores do índice de escoamento, onde nota-se a atuação das cotas superior, η_0 , e inferior, η_{∞} , e o início da região *power-law* estabelecido por $\dot{\gamma}_1$.

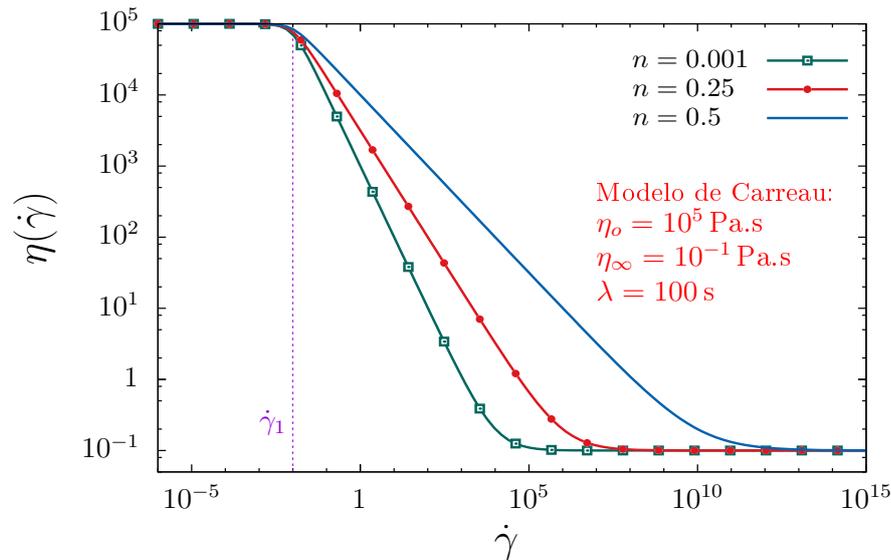


Figura 3.2 – Modelos de fluidos de Carreau.

3.3 Modelos de viscoplasticidade

Escoamentos de materiais viscoplásticos são encontrados com frequência em processos naturais e industriais. Exemplos de alguns desses materiais incluem suspensões, lamas, pastas, etc. Uma das características mais importantes desses materiais é presença de uma *Tensão Limite de Escoamento* (ou *Yield Stress*).

A definição típica do termo “*to yield*” seria “*ceder sob pressão*” e isso implica em uma abrupta e profunda mudança no comportamento para um estado de menor resistência. Desse modo, a Tensão Limite de Escoamento é um valor crítico de tensão, onde o material exibe pouca ou nenhuma deformação abaixo desse valor e acima dele o material escoava [Papanastasiou, 1987]. Esses materiais também são frequentemente chamados de Plásticos de Bingham, devido a Eugene C. Bingham, 1922, quem primeiro os descreveu dessa forma.

Historicamente, este fenômeno foi retratado em gráfico de tensão aplicada por taxa de cisalhamento plotados em escala linear, dando uma limitada faixa de alcance para a taxa de cisalhamento. Porém, quando plotados em escala logarítmica o fenômeno é muito melhor ilustrado [Barnes, 1999].

Alguns dos modelos mais citados na literatura são apresentados a seguir, a fim de comparar qualitativamente suas capacidades de modelar os fenômenos que envolvem viscoplasticidade.

3.3.1 Plásticos de Bingham

Este tipo de fluido apresenta relação linear entre tensão de cisalhamento, τ , e a taxa de deformação, $\dot{\gamma}$, a partir do momento em que se atinge a tensão limite de escoamento [Bingham, 1922]. As equações que modelam o comportamento desse tipo de fluido são descritas por

$$\tau = \tau_0 + \mu_p \dot{\gamma}, \quad \text{para } \tau > \tau_0 \quad (3.6)$$

$$\dot{\gamma} = 0, \quad \text{para } \tau \leq \tau_0, \quad (3.7)$$

onde τ_0 é a tensão limite de escoamento e μ_p é a viscosidade plástica.

3.3.2 Modelo de Herschel-Bulkley

Também é conhecido como modelo de Bingham generalizado [Bird, 1982]. Esse tipo de fluido também necessita de uma tensão inicial para começar a escoar. Entretanto, a relação entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação não é linear. Esta relação depende do expoente adimensional n , característico para cada fluido.

$$\tau = \tau_0 + K \dot{\gamma}^n, \quad \text{para } \tau > \tau_0, \quad (3.8)$$

$$\dot{\gamma} = 0, \quad \text{para } \tau \leq \tau_0. \quad (3.9)$$

Quando $n = 1$, tem-se $K = \mu_p$ e o modelo clássico de Bingham é recuperado.

3.3.3 Modelo de Papanastasiou

O modelo de Bingham é importante porque ele ajuda a modelar bem alguns fluidos reais e ainda é possível, em alguns casos, obter a solução analítica para o campo do escoamento, como por exemplo o escoamento Poiseuille e Couette. Porém, a equação constitutiva é em geral desafiadora para trabalhar numericamente devido à dificuldade em encontrar as regiões de escoamento (yield surfaces) no domínio estudado. Papanastasiou modificou o modelo de Bingham (3.6)-(3.7) adicionando um termo exponencial para amortecer o termo da tensão limite de escoamento [Papanastasiou, 1987]. Note que, nos fluidos de Bingham quando $\dot{\gamma} = 0$ a função viscosidade, $\eta(\dot{\gamma})$, muda abruptamente de um valor infinito para uma constante de viscosidade finita η_0 . Papanastasiou, porém, definiu

a função viscosidade como uma função crescente de $\dot{\gamma}$, como

$$\eta(\dot{\gamma}) = \mu_p + \frac{\tau_0(1 - \exp(-m_r \dot{\gamma}))}{\dot{\gamma}}, \quad (3.10)$$

onde μ_p é a viscosidade plástica, τ_0 é a tensão limite de escoamento e m_r é um parâmetro regularizador. Os valores de m_r determinam a taxa de crescimento exponencial para a constante de viscosidade η_0 . Para a tensão de cisalhamento, segue de (3.10),

$$\tau = \left[\mu_p + \frac{\tau_0(1 - \exp(-m_r \dot{\gamma}))}{\dot{\gamma}} \right] \dot{\gamma}. \quad (3.11)$$

No limite de m_r tendendo ao infinito a tensão de cisalhamento para o fluido de Bingham é obtida.

3.4 Nova Função Viscosidade

Para contornar as dificuldades com as assíntotas, da regularização de Papanastasiou, uma nova função viscosidade para fluidos viscoplásticos é proposta e denominada como modelo *Viscoplástico Harmônico (VPH)*¹.

Esse modelo foi originalmente concebido pelo Dr. Paulo Roberto de Souza Mendes, professor titular e chefe do GReo (Grupo de Reologia) na PUC-RJ, como alternativa ao seu modelo predecessor conhecido como *Modelo SMD* [De Souza Mendes e Dutra, 2004].

O GReo tem trabalhado há anos em parceria com o LAMAC/UFRGS, chefiado pelo Dr. Sérgio Frey, e produzido inúmeros trabalhos de relevância nacional e internacional na área da reologia. Como prova disso, esta tese oferece os primeiros resultados já produzidos com o uso de um novo modelo de função viscoplástica, o modelo VPH. A equação que estabelece o novo modelo é dada por:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \left[\frac{1}{\eta_0} + \frac{\dot{\gamma}}{\tau_0 + K\dot{\gamma}^n + \eta_\infty \dot{\gamma}} \right]^{-1}, \quad (3.12)$$

onde $\dot{\gamma}$ é taxa de cisalhamento, η_0 e η_∞ são respectivamente os limites superior e inferior da função viscosidade, τ_0 é a tensão limite de escoamento, K é um índice de consistência e n é o índice de escoamento.

Uma outra característica da Eq. (3.12) é que ela prediz um valor fixo de viscosidade no limites superior e inferior, em contraste com o modelo de Papanastasiou, 1987, que apresenta viscosidade ilimitada quando a taxa de cisalhamento é igual a zero (ver

¹No inglês, Harmonic Viscoplastic Function (HVP)

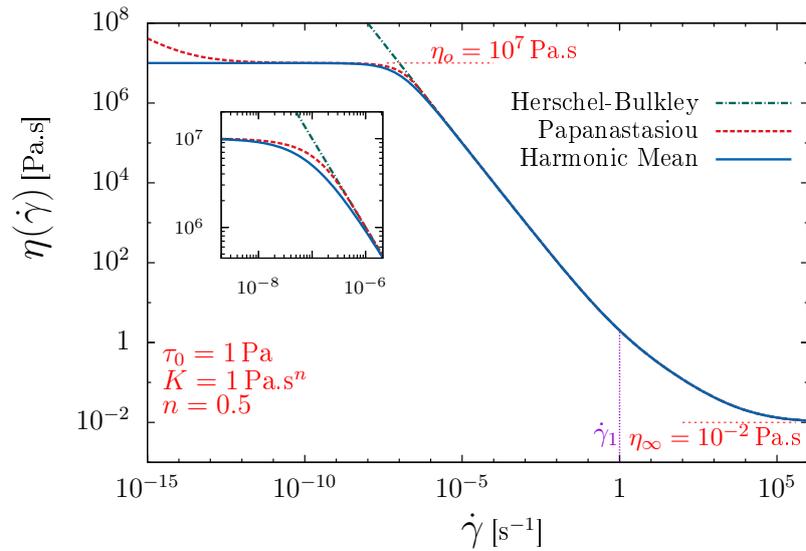
Figura 3.3(a)). Com efeito, quando $\dot{\gamma} \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) &= \left\{ \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \frac{1}{\eta_o} + \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \frac{\dot{\gamma}}{\tau_o + K\dot{\gamma}^n + \eta_\infty \dot{\gamma}} \right\}^{-1} = \left\{ \frac{1}{\eta_o} + \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \frac{\dot{\gamma}}{\tau_o + K\dot{\gamma}^n + \eta_\infty \dot{\gamma}} \right\}^{-1} \\ &\stackrel{(*)}{=} \left\{ \frac{1}{\eta_o} + \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \frac{1}{Kn\dot{\gamma}^{n-1} + \eta_\infty} \right\}^{-1} = \left\{ \frac{1}{\eta_o} \right\}^{-1} = \eta_o, \quad \text{para } n < 1. \end{aligned} \quad (3.13)$$

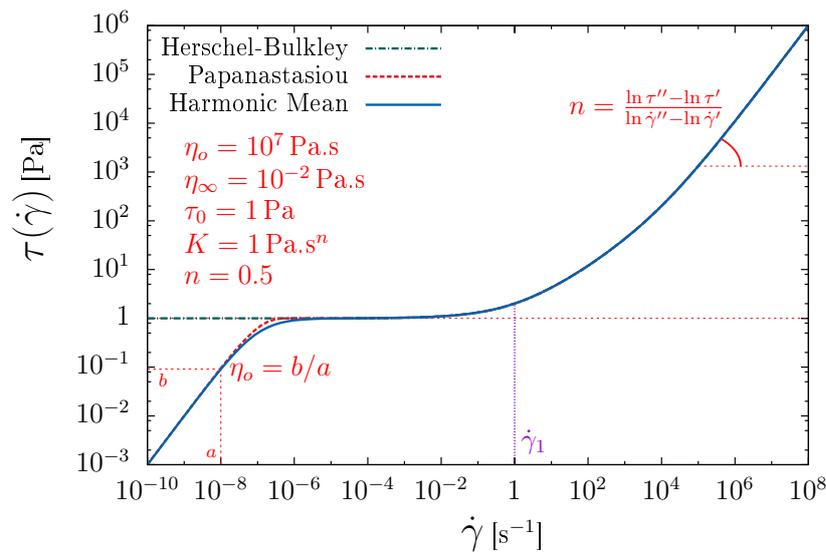
Quando $\dot{\gamma} \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \eta(\dot{\gamma}) &= \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\eta_o} + \frac{\dot{\gamma}}{\tau_o + K\dot{\gamma}^n + \eta_\infty \dot{\gamma}} \right\}^{-1} = \left\{ \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau_o \dot{\gamma}} + \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \frac{\dot{\gamma}}{\tau_o + K\dot{\gamma}^n + \eta_\infty \dot{\gamma}} \right\}^{-1} \\ &\stackrel{(*)}{=} \left\{ \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \frac{1}{Kn\dot{\gamma}^{n-1} + \eta_\infty} \right\}^{-1} = \left\{ \frac{1}{\eta_\infty} \right\}^{-1} = \eta_\infty, \quad \text{para } n < 1, \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde em (*) foi utilizado o *Regra de L'Hôpital* do Cálculo.



(a) Viscosidade



(b) Tensão de Cisalhamento

Figura 3.3 – Comparaç o entre o comportamento dos modelos para os campos escalares de

(a) Viscosidade e (b) Tens o de Cisalhamento

Uma das caracter sticas mais importantes da funç o viscopl stica harm nica   que ela consegue fazer um ajuste de curva t o bom quanto os modelos encontrados na literatura. Isso pode ser notado na Figura 3.3, onde a funç o viscosidade e tens o cisalhante, obtida por $\tau(\dot{\gamma}) = \eta(\dot{\gamma})\dot{\gamma}$, s o comparadas com os modelos de *Herschel-Bulkley* e *Papanastasiou*. Nota-se graficamente a representaç o de η_0 e η_∞ das equaç es (3.13)-(3.14),

na qual a viscosidade nas baixas taxas de cisalhamento, η_0 , é a razão entre a intensidade da tensão e a taxa de cisalhamento tomadas em uma região onde τ seja suficientemente menor que τ_0 , garantindo que $\dot{\gamma}$ esteja dentro da faixa de alta viscosidade; Na Figura 3.3b fica evidente a tensão limite de escoamento pela linha horizontal pontilhada em $\tau_0 = 1\text{Pa}$, assim como o índice n que representa a inclinação da região power-law no gráfico log-log.

O modelo VPH, descrito nesta seção, foi usado na obtenção dos resultados para escoamentos de fluidos elasto-viscoplásticos com comportamento tixotrópico. O processo para a inserção dessa função nas equações que modelam a tixotropia é apresentado com mais detalhes na Seção 4.4.3.

3.5 Tixotropia

Existem fluidos reais que não podem ser descritos simplesmente como um fluido newtoniano generalizado, pois a viscosidade nesses fluidos não depende só da taxa de deformação, mas também do tempo de cisalhamento. Atualmente há um certo consenso na comunidade científica que define a tixotropia como: *o contínuo decréscimo da viscosidade com o tempo, quando aplicado um escoamento a um fluido inicialmente em repouso e uma subsequente recuperação da viscosidade, no tempo, quando o escoamento é cessado* [Mewis e Wagner, 2009]. Essa definição também é compatível com sistema de terminologias [IUPAC, 1997]². Apesar disso, ainda existem diferentes definições em dicionários e enciclopédias científicas frequentemente mais relacionadas com a definição original de Freundlich [Barnes, 1997].

Fenômenos de tixotropia têm sido relatados para um grande número de produtos, e.g., tintas, cristais líquidos, emulsões e misturas de duas fases. Na natureza, tixotropia pode ser encontrada em minerais e no mundo dos seres vivos. Sistemas micelares, lamas em terra, ou em leito de rios também podem ser consideradas tixotrópicas. Em organismos vivos, incluindo humanos, a tixotropia pode aparecer em fluidos biológicos, tal como o sangue [Huang e Fabisiak, 1976; Huang et al., 1975]. Glóbulos vermelhos podem agregar-se em pilhas cilíndricas que por sua vez podem se juntar para formar estruturas ramificadas. Essas estruturas dependem do histórico de escoamento e afetam a viscosidade.

Quando um material tem que ser aplicado sobre um substrato para formar uma

²A União Internacional de Química Pura e Aplicada (em inglês: International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC) é uma organização não governamental (ONG) internacional dedicada ao avanço da química.

camada, uma viscosidade dependente do tempo pode ser benéfica. Tintas pertencem ao mais recente grupo de materiais industriais tixotrópicos que tem sido estudados [Gamble, 1936; McMillen, 1932]. Suspensões magnéticas e soluções adesivas termoplásticas são também aplicados por processo de revestimento e podem exibir propriedades de dependência temporal similares. Um alto grau de pseudoplasticidade é então desejado, que é frequentemente acompanhado de um fenômeno tixotrópico. Aplicação de cremes sobre a pele é mecanicamente uma operação similar e ilustra o uso de produtos tixotrópicos no cuidado pessoal e áreas farmacêutica.

Em quase todas as aplicações de suspensões tixotrópicas é necessário uma viscosidade relativamente baixa nas altas taxas de cisalhamento a fim de processar ou aplicar o produto adequadamente e/ou facilmente. Uma vez processado ou aplicado, o material deve ou parar de escoar, ou escoar suficientemente lento sob as baixas tensões que o produto pode ainda estar sujeito. Frequentemente é a gravidade que causa um escoamento indesejável, tal como em uma camada de tinta que cede de uma parede vertical. Em alguns casos, a alta viscosidade serve para evitar a sedimentação de partículas pesadas ou gotículas durante o armazenamento ou após o processamento, tal como em lamas de perfuração e concreto. O endurecimento nas baixas tensões pode também evitar o gotejamento indesejado, como em tintas e alguns tipos de alimentos.

Diferentes aproximações já foram propostas para incluir a tixotropia nos modelos reológicos. Por um lado, existem modelos fenomenológicos bastante gerais a serem utilizados na caracterização de materiais desconhecidos ou complexos. Por outro lado, existe necessidade de modelos micromecânicos que consigam prever o comportamento tixotrópico baseado na natureza dos componentes, modelos subjacentes e as leis físicas que os governem. Modelos tixotrópicos de qualquer dos tipos ainda são escassos.

Uma classe de modelos fenomenológicos é baseado nos princípios gerais da mecânica do contínuo racional [Mewis e Wagner, 2009]. Esses modelos normalmente descrevem os efeitos temporais por meio de funções de memória, um procedimento comum na teoria de viscoelasticidade. Uma segunda classe usa um *parâmetro de estrutura* para expressar o nível de estruturação do material. Esses modelos associam uma resposta reológica à estrutura instantânea, onde a dependência temporal é expressa por uma equação cinética ou *equação de evolução* para o parâmetro de estrutura. Ambas as classes podem gerar equações de estado inelásticas, assim como viscoelásticas e, na verdade, formam um espec-

tro mais ou menos contínuo de modelos. Existe ainda um terceiro grupo de modelos que é baseado em aproximações microestruturais. Elas consideram complexas mudanças envolvendo o escoamento induzido, e nesse caso são necessárias simplificações significativas. Exemplos dessas classes de modelos podem ser vistas no trabalho de [Mewis e Wagner, 2009]. Neste trabalho foi utilizado apenas os modelos citados na segunda classe e que, portanto, envolvem o parâmetro de estrutura.

4 MODELAGEM MECÂNICA

Neste capítulo são abordados os principais modelos e estruturas necessárias para a obtenção das equações que modelam o problema em questão. Desse modo, alguns tópicos sobre mecânica do contínuo são abordados, como a descrição do movimento de partículas, equações de conservação da massa e da quantidade de movimento. Além de introduzir tópicos mais específicos como fluidos newtonianos generalizados, modelos de viscoplasticidade, a nova função viscosidades proposta neste trabalho e equações constitutivas. No final do capítulo é apresentado também um resumo das equações mais utilizadas.

4.1 Cinemática dos Fluidos

A ideia básica do movimento de fluidos é que ele pode ser descrito por um *ponto de transformação*. Em certo momento, nota-se que uma partícula está em uma posição \mathbf{X} e um tempo depois a mesma partícula está na posição \mathbf{x} . Sem perda de generalidade, pode-se tomar o primeiro instante como o tempo $t = 0$ e se o instante seguinte é o tempo t , diz-se que \mathbf{x} é uma função de t e da posição inicial \mathbf{X} ,

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) \quad \text{ou} \quad x_i = x_i(X_1, X_2, X_3, t). \quad (4.1)$$

As coordenadas \mathbf{X} da partícula serão referenciadas como *coordenadas materiais* da partícula¹. Assumindo que o movimento da partícula é contínuo e que a equação (4.1) pode ser invertida para obter a posição inicial, ou coordenadas materiais da partícula que está na posição \mathbf{x} no tempo t , i.e.,

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t) \quad \text{ou} \quad X_i = X_i(x_1, x_2, x_3, t) \quad (4.2)$$

são funções contínuas. As coordenadas \mathbf{x} da partícula são descritas como *coordenadas espaciais* e referem-se a sua posição no espaço.

A descrição material de alguma propriedade, $\mathfrak{F}(\mathbf{X}, t)$, pode ser mudada para uma descrição espacial $\mathfrak{F}(\mathbf{x}, t)$, pela equação (4.2),

$$\mathfrak{F}(\mathbf{x}, t) = \mathfrak{F}[\mathbf{X}(\mathbf{x}, t), t]. \quad (4.3)$$

Fisicamente isso diz que o valor de uma propriedade na posição \mathbf{x} e tempo t é o valor

¹Os termos coordenadas *convectada* e *Lagrangeana* são também comuns na literatura

apropriado da partícula que está na posição \mathbf{x} e tempo t . Por outro lado, a descrição material pode ser derivada da espacial pela equação (4.1)

$$\mathfrak{F}(\mathbf{X}, t) = \mathfrak{F}[\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t], \quad (4.4)$$

significando que o valor da propriedade visto pela partícula no tempo t é o valor na posição que ela ocupa e naquele tempo.

Associado com essas descrições estão as derivadas com respeito ao tempo. Assim $\partial\mathfrak{F}/\partial t$ é a taxa de variação de \mathfrak{F} quando observada de um ponto fixo \mathbf{x} , ao passo que $D\mathfrak{F}/Dt$ é taxa de variação observada quando o observador move-se com a partícula. Essa última também é chamada de *derivada material*. Em particular a derivada material da posição de uma partícula é sua velocidade. Desse modo, colocando $\mathfrak{F} = x_i$, tem-se

$$u_i = \frac{Dx_i}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t}x_i(X_1, X_2, X_3, t) \quad \text{ou} \quad \mathbf{u} = \frac{D\mathbf{x}}{Dt}. \quad (4.5)$$

Isso permite estabelecer uma conexão entre as duas derivadas, por

$$\frac{D\mathfrak{F}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t}\mathfrak{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial}{\partial t}\mathfrak{F}[\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t] \quad (4.6)$$

$$= \frac{\partial\mathfrak{F}}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t} \Big|_X + \frac{\partial\mathfrak{F}}{\partial t} \Big|_x \quad (4.7)$$

$$= u_i \frac{\partial\mathfrak{F}}{\partial x_i} + \frac{\partial\mathfrak{F}}{\partial t}, \quad (4.8)$$

onde os subíndices X e x representam que essas variáveis estão fixas com relação à derivada. Em alguns casos também é conveniente escrever,

$$\frac{D\mathfrak{F}}{Dt} = \frac{\partial\mathfrak{F}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathfrak{F}. \quad (4.9)$$

4.2 Equação de Conservação de Massa

Considere $\rho(\mathbf{x}, t)$ a massa por unidade de volume de um fluido homogêneo na posição \mathbf{x} e tempo t . Então a massa, \mathbf{m} , em qualquer volume finito Ω é

$$\mathbf{m} = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \, d\Omega. \quad (4.10)$$

Se Ω é um volume material, isto é, se ele é composto das mesmas partículas e não há a ação de fontes externas no meio, pode-se assumir que a massa não muda. Assim, assumindo

que $\mathfrak{F} = \rho$ na equação do Teorema 2.1 e usando o Teorema da Divergência, tem-se

$$\frac{D\mathbf{m}}{Dt} = \int_{\Omega} \left\{ \frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} \right\} d\Omega = 0. \quad (4.11)$$

Note que para um volume arbitrário, o integrando deve ser nulo em todo o domínio. Com efeito, suponha que ele não é nulo em algum ponto P , mas sim positivo. Então, já que o integrando é contínuo ele deveria ser positivo em alguma vizinhança de P e tomando Ω como subconjunto dessa vizinhança, a integral sobre Ω não se anularia. Assim, segue que

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (4.12)$$

que é conhecida como a *equação da continuidade*.

Se o fluido é incompressível, $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0$, (massa específica constante) a equação (4.12) reduz-se a

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \quad (4.13)$$

que é uma restrição na velocidade do fluido, \mathbf{u} .

De forma genérica, se uma força tenta comprimir um fluido incompressível (e.g. um líquido), sua massa específica não muda, mas a pressão, por outro lado, aumenta. Por exemplo, a água tem um certo peso, então seu peso sozinho age como uma força. A massa específica da água no fundo do oceano é muito próxima à massa específica na superfície, mas a pressão no fundo do oceano é muito maior do que na superfície.

4.3 Equação da Quantidade de Movimento

A equação da quantidade de movimento tem grande importância na descrição do comportamento do escoamento de um fluido. Essa equação é uma afirmação decorrente da segunda lei de Newton e diz respeito à soma das forças que atuam sobre um elemento de fluido para a sua aceleração ou a taxa de variação da quantidade de movimento.

A equação da quantidade de movimento pode ser descrita como

$$\left(\begin{array}{c} \text{Fluxo líquido da} \\ \text{quantidade de} \\ \text{movimento dentro} \\ \text{do sistema} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Soma de todas} \\ \text{as forças} \\ \text{de superfície} \\ \text{do sistema} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Soma de todas} \\ \text{as forças} \\ \text{de corpo} \\ \text{do sistema} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Taxa de crescimento} \\ \text{da quantidade} \\ \text{de movimento} \\ \text{do sistema} \end{array} \right) \quad (4.14)$$

A forma euleriana da equação da quantidade de movimento é obtida escrevendo explicitamente os termos que aparecem na equação (4.14) quando aplicada a uma vizinhança

diferencial de um ponto.

A fim de expressar o fluxo líquido de entrada da quantidade de movimento, o primeiro termo do lado esquerdo de (4.14) é obtido levando em conta a expressão,

$$\rho \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{\Gamma} = \mathbf{u}(\rho \mathbf{u} \cdot d\mathbf{\Gamma}), \quad (4.15)$$

onde \mathbf{u} é o campo de velocidade, ρ é a massa específica, $d\mathbf{\Gamma}$ é um elemento vetorial de superfície direcionado para fora da região do espaço considerado (também escrito como $\mathbf{n}d\Gamma$). O termo entre parênteses no lado direito é a taxa de escoamento de massa (vazão) através da superfície do elemento considerado; assim $\rho \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{\Gamma}$ é visto como o fluxo da quantidade de movimento através do mesmo elemento de superfície [Astarita e Marrucci, 1974].

Uma identidade análoga ao Teorema 2.2 para um campo tensorial \mathbf{A} ,

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{A}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{\Gamma}, \quad (4.16)$$

permite identificar $\rho \mathbf{u} \mathbf{u}$ como o fluxo líquido de saída da quantidade de movimento por unidade volume:

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \left(\begin{array}{c} \text{Fluxo líquido de saída da} \\ \text{quantidade de movimento} \\ \text{por unidade de volume} \end{array} \right). \quad (4.17)$$

Considerando o segundo termo da equação (4.14), i.e., a soma de todas as forças de superfície. A força de tensão $d\mathbf{t}$ atuando através de qualquer elemento de superfície, $d\mathbf{\Gamma}$, é, pela definição do tensor tensão total,

$$d\mathbf{t} = \mathbf{T} \cdot d\mathbf{\Gamma}. \quad (4.18)$$

Considerando a equação (4.16), o lado direito da expressão anterior é visto como a resultante das forças de superfície, e a divergência de \mathbf{T} é a resultante por unidade de volume:

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}) = \left(\begin{array}{c} \text{Resultante das} \\ \text{forças de superfície} \\ \text{por unidade de volume} \end{array} \right). \quad (4.19)$$

Como será visto mais adiante, para fluidos de massa específica constante a equação constitutiva determina a tensão total \mathbf{T} com um tensor isotrópico aditivo. Desse modo,

torna-se útil decompor a tensão total como

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}', \quad (4.20)$$

onde p é chamado de pressão (não no sentido termodinâmico), \mathbf{I} é o tensor identidade e $\boldsymbol{\tau}'$ é um tensor deviatório, i.e.,

$$\text{tr}\boldsymbol{\tau}' = 0. \quad (4.21)$$

A decomposição da equação (4.20) é única. De fato, se o traço é tomado, obtém-se

$$\text{tr}\mathbf{T} = -3p, \quad (4.22)$$

que é uma definição operacional para a pressão. A divergência da tensão total pode agora ser decomposta como²

$$\text{div}\mathbf{T} = \text{div}\boldsymbol{\tau}' - \nabla p. \quad (4.23)$$

O terceiro termo da equação (4.14), quando expresso por unidade de volume do sistema, é simplesmente $\rho\mathbf{g}$, onde \mathbf{g} é o campo de aceleração (geralmente aceleração da gravidade).

O lado direito da equação (4.14), quando expressa por unidade de volume do sistema, é a derivada parcial com relação ao tempo do vetor $\rho\mathbf{u}$. Assim, finalmente, considerando as equações (4.17), (4.19) e (4.23) a forma euleriana da equação da quantidade de movimento é obtida:

$$\text{div}(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) - \nabla p + \text{div}(\boldsymbol{\tau}') + \rho\mathbf{g} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{u}). \quad (4.24)$$

A forma lagrangeana da equação da quantidade de movimento é obtida através de manipulação algébrica da equação (4.24)³. Desse modo,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{u}) + \text{div}(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = \rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho\nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u}[\text{div}(\rho\mathbf{u})] \quad (4.25)$$

e substituindo a equação (4.12)⁴:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{u}) + \text{div}(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = \rho \left[\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right] = \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \quad (4.26)$$

A expressão dentro dos colchetes (4.26) é reconhecida por ser a derivada lagrangeana

²As identidades usadas são descritas no Apêndice A.2

³As identidades utilizadas podem ser vistas com mais detalhes no Apêndice A.2

⁴Notações equivalentes para $D\mathbf{u}/Dt$ são $\ddot{\mathbf{X}}$ e $\dot{\mathbf{u}}$

(ou substantiva) da velocidade. Substituindo (4.26) na equação (4.24) obtém-se a forma lagrangeana da equação da quantidade de movimento

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}') + \rho \mathbf{g}. \quad (4.27)$$

O lado esquerdo de (4.27) é a força inercial devido à aceleração da partícula igual as forças de superfície e de corpo agindo sobre ela que aparecem no lado direito.

4.3.1 Pressão

O significado físico da pressão precisa ser esclarecido no caso de fluidos com massa específica constante. De fato, a pressão como aparece na Eq. (4.27) não pode ser identificada com uma pressão termodinâmica [Astarita e Marrucci, 1974, Pg. 35].

A equação constitutiva para fluidos de massa específica constante determina o tensor tensão apenas para um tensor isotrópico aditivo arbitrário. A tensão total \mathbf{T} pode ser expressa como

$$\mathbf{T} = -\alpha \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (4.28)$$

com α um escalar arbitrário e $\boldsymbol{\tau}$ é chamado de *Tensor Extra de Tensão*, que é dado por uma equação constitutiva. O escalar α não deve ser considerado uma pressão já que o traço de $\boldsymbol{\tau}$ não é necessariamente zero.

Comparando as equações (4.20) e (4.28) obtém-se a seguinte relação

$$-\alpha \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} = -p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}' \quad (4.29)$$

e assim

$$\operatorname{tr} \boldsymbol{\tau} = 3(\alpha - p). \quad (4.30)$$

Substituindo a equação (4.30) na equação (4.29) e isolando o tensor deviatório, tem-se

$$\boldsymbol{\tau}' = \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{3}(\operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}) \mathbf{I}. \quad (4.31)$$

Assuma que o campo de velocidade está determinado e que uma equação constitutiva para o fluido foi dada. Se a equação constitutiva é do tipo que fornece uma tensão deviatória, então $\boldsymbol{\tau}'$ é calculado e da equação da quantidade de movimento (4.27) ∇p é

determinado. Conseqüentemente, o campo de pressão é calculado para uma constante arbitrária aditiva. Se, como é mais comum, a equação constitutiva fornece um tensor extra não-deviatório, então do valor de $\boldsymbol{\tau}$ é obtido $\boldsymbol{\tau}'$ da equação (4.31) e ∇p é calculado da equação (4.27), como antes.

Usando as equações (4.30)-(4.31), a equação da quantidade de movimento pode ser escrita em termos do tensor extra de tensão $\boldsymbol{\tau}$ e α ou p , dependendo da necessidade, i.e.,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla\alpha + \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}) + \rho\mathbf{g}, \quad (4.32)$$

$$= -\nabla\left(p + \frac{1}{3}\operatorname{tr}\boldsymbol{\tau}\right) + \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}) + \rho\mathbf{g}. \quad (4.33)$$

4.4 Equações Constitutivas

O sistema de equações formado por (4.13) e (4.27) é não-determinado, pois os campos desconhecidos (velocidade, pressão, tensão) não podem ser determinados a partir de duas equações. Conseqüentemente, existe a necessidade de equações representando o comportamento físico do material, i.e., uma *relação constitutiva*. A relação constitutiva permite que a tensão seja calculada como função das variáveis cinemáticas [Astarita e Marrucci, 1974, Pg. 3].

4.4.1 Maxwell Convectado Superior (UCM)

O modelo de Maxwell Convectado Superior (UCM, sigla em inglês) é uma generalização do modelo de Maxwell para o caso de grandes deformações usando a derivada convectada superior no tempo. O modelo foi proposto por James G. Oldroyd e nomeado após James Clerk Maxwell [Oldroyd, 1950]. Esse modelo consiste em combinar os elementos que representam o comportamento reológico do material fazendo referência ao modelo mecânico de um circuito em série de uma mola e um amortecedor (ver Figura 4.1).

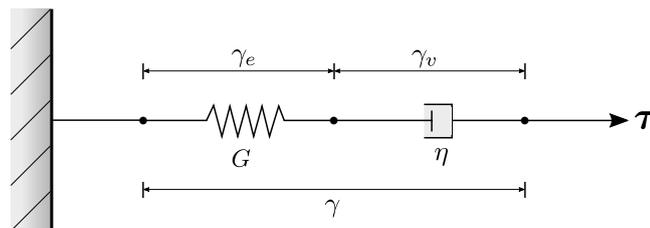


Figura 4.1 – Representação esquemática do Modelo de Maxwell

Sob uma certa tensão aplicada $\boldsymbol{\tau}$, a deformação total, γ , corresponde a deformação produzida na mola, γ_e , e a deformação sofrida no amortecedor, γ_v , i.e.,

$$\gamma = \gamma_e + \gamma_v, \quad (4.34)$$

e as tensões elástica (na mola) e viscosa (no amortecedor) são respectivamente,

$$\tau_e = G\gamma_e, \quad (4.35)$$

$$\tau_v = \eta\dot{\gamma}_v, \quad (4.36)$$

onde G é o módulo de elasticidade e η é a viscosidade. Note que a tensão total é $\tau = \tau_e = \tau_v$. Assim, pela derivada da Eq. (4.34) em relação ao tempo, tem-se

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{d\gamma_e}{dt} + \frac{d\gamma_v}{dt} \implies \dot{\gamma} = \dot{\gamma}_e + \dot{\gamma}_v. \quad (4.37)$$

Aplicando a derivada na Eq. (4.35) e usando a Eq. (4.36), resulta em

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{1}{G} \frac{d\tau_e}{dt} + \frac{\tau_v}{\eta}. \quad (4.38)$$

Multiplicando ambos lados pela viscosidade, η , e usando o fato de que a tensão é igual nos dois elementos, tem-se

$$\eta \frac{d\gamma}{dt} = \frac{\eta}{G} \frac{d\tau}{dt} + \tau. \quad (4.39)$$

A razão entre viscosidade e o módulo de elasticidade tem dimensão de tempo e é denominado como tempo de relaxação do fluido, θ . Para derivar a tensão no tempo, utiliza-se a derivada de *Jaumann*, definida no Apêndice A.1.

Aplicando ao tensor extra de tensão a derivada de Jaumann convectada superior tem-se

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\nabla \boldsymbol{\tau})\mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}(\nabla \mathbf{u})^T. \quad (4.40)$$

A taxa de deformação dada pela variação temporal da deformação, pode ser expressa na forma tensorial pelo tensor taxa de deformação, \mathbf{D} . Desse modo, o modelo de Maxwell é definido como

$$\boldsymbol{\tau} + \theta \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{u}). \quad (4.41)$$

Esse modelo representa o comportamento reológico de um fluido viscoelástico. Para o caso com tensão constante, resulta $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \mathbf{0}$, a equação de Maxwell reduz-se ao caso newtoniano, $\boldsymbol{\tau} = 2\eta\mathbf{D}(\mathbf{u})$.

4.4.2 Modelo de Oldroyd-B

O modelo de Oldroyd-B também é usado para descrever o escoamento de fluidos viscoelásticos [Bodnár e Sequeira, 2010].

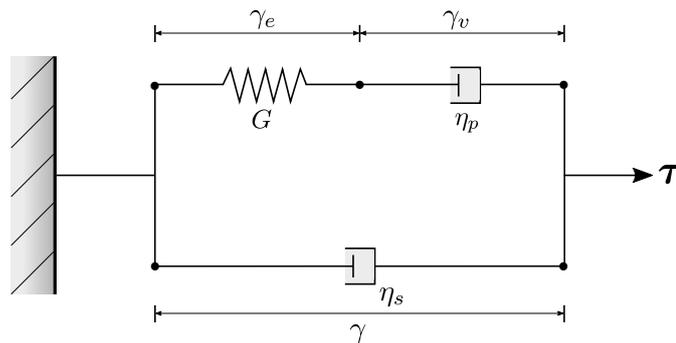


Figura 4.2 – Representação esquemática do Modelo de Oldroyd-B

O modelo pode ser escrito como

$$\boldsymbol{\tau} + \theta_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_t(\mathbf{D}(\mathbf{u}) + \theta_2 \overset{\nabla}{\mathbf{D}}(\mathbf{u})), \quad (4.42)$$

onde $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor extra de tensão, θ_1 é o tempo de relaxação, θ_2 é o tempo de retardamento, $\eta_t = \eta_s + \eta_p$ é a viscosidade total dada pela soma da viscosidade do solvente (η_s) pela viscosidade do polímero (η_p) e $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ é o tensor taxa de deformação.

O modelo também pode ser descrito separando o tensor extra de tensão como a soma de uma parcela viscoelástica, $\boldsymbol{\tau}_1$, que satisfaz o modelo UCM, e da parcela com o solvente newtoniano, $\boldsymbol{\tau}_2$. Assim,

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2, \quad (4.43)$$

$$\boldsymbol{\tau}_1 + \theta_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 = 2\eta_p \mathbf{D}(\mathbf{u}), \quad (4.44)$$

$$\boldsymbol{\tau}_2 = 2\eta_s \mathbf{D}(\mathbf{u}). \quad (4.45)$$

4.4.3 Equação constitutiva para fluidos tixotrópicos

A equação constitutiva para fluidos estruturados é baseada na formulação de Oldroyd-B e proposta por [De Souza Mendes, 2011], onde a viscosidade e módulo de elasticidade são expressos em termos do parâmetro de estrutura, λ , que por definição varia entre 0 e 1.

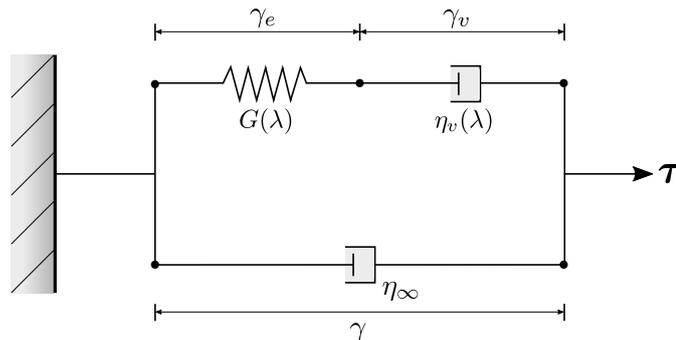


Figura 4.3 – Representação esquemática do modelo para fluidos tixotrópicos

A Figura 4.3 mostra a representação esquemática do modelo utilizado neste trabalho. Para esse modelo, a equação constitutiva é dada por

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2, \quad (4.46)$$

$$\boldsymbol{\tau}_1 + \theta(\lambda) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 = 2\eta_v(\lambda) \mathbf{D}(\mathbf{u}), \quad (4.47)$$

$$\boldsymbol{\tau}_2 = 2\eta_\infty \mathbf{D}(\mathbf{u}). \quad (4.48)$$

onde η_v é a viscosidade estrutural. O tempo de relaxação θ é definido em termos da função implícita de λ , i.e.,

$$\theta(\lambda) = \frac{\eta_v(\lambda)}{G(\lambda)}. \quad (4.49)$$

Nota-se que o conjunto de equações (4.46)-(4.48) tem a mesma forma da equação constitutiva de Oldroyd-B, contudo G e η_v não são parâmetros constantes.

Para que a função módulo de elasticidade, $G(\lambda)$, seja fisicamente realista, ela deve atingir seu valor mínimo quando o material está completamente estruturado ($\lambda = 1$) e ser estritamente crescente quando λ decresce, para que a resposta elástica decresça quando a estrutura do material é destruída. No limite de um material completamente não-estruturado ($\lambda = 0$), $G(\lambda)$ deve ser infinito a fim de suprimir completamente a resposta elástica, e assim garantir um comportamento puramente viscoso. Desse modo, pode-se

definir o módulo de elasticidade como

$$G(\lambda) = G_0 \exp \left[m \left(\frac{1}{\lambda} - 1 \right) \right], \quad (4.50)$$

onde G_0 é o módulo de elasticidade para o material completamente estruturado e m é uma constante adimensional positiva.

Por outro lado, a viscosidade estrutural, $\eta_v(\lambda)$, varia entre η_∞ e η_0 , onde η_∞ é a viscosidade do material completamente não-estruturado ($\lambda = 0$) e η_0 é a viscosidade para o material completamente estruturado ($\lambda = 1$). Como na maioria dos escoamento viscoplásticos $\eta_0 \gg \eta_\infty$, a função $\eta_v(\lambda)$ deve ser capaz de mapear o intervalo $[0, 1]$ no intervalo $[\eta_\infty, \eta_0]$. Convenientemente, a viscosidade estrutural é

$$\eta_v(\lambda) = \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right)^\lambda \eta_\infty. \quad (4.51)$$

A Eq. (4.51) pode ser resolvida em função de λ de modo a obter,

$$\lambda_{eq}(\dot{\gamma}) = \frac{\ln \eta_{eq}(\dot{\gamma}) - \ln \eta_\infty}{\ln \eta_0 - \ln \eta_\infty}, \quad (4.52)$$

onde λ_{eq} é o parâmetro de estruturação em equilíbrio, η_{eq} é a viscosidade em estado de equilíbrio dada pela Eq. (3.12), ou seja,

$$\eta_{eq}(\dot{\gamma}) = \left[\frac{1}{\eta_0} + \frac{\dot{\gamma}}{\tau_0 + K\dot{\gamma}^n + \eta_\infty\dot{\gamma}} \right]^{-1}. \quad (4.53)$$

4.5 Equação de evolução para o parâmetro de estrutura

A equação de evolução também definida segundo [De Souza Mendes, 2009], é dada por

$$\frac{D\lambda}{Dt} = \frac{1}{t_{eq}} [(1 - \lambda) - f(\tau)\lambda], \quad (4.54)$$

onde t_{eq} é definido como tempo de equilíbrio da microestrutura. O lado esquerdo da Eq. (4.54) representa a derivada material de λ em relação ao tempo. No lado direito, o primeiro termo descreve a construção da microestrutura (*buildup term*) e o segundo termo representa a quebra da microestrutura do fluido (*breakdown term*).

A função associada com o termo de quebra da microestrutura, $f(\tau)$, é comumente associada à taxa de deformação $\dot{\gamma}$, tal que ela se anula quando $\dot{\gamma} = 0$ e é estritamente crescente quando $\dot{\gamma}$ cresce (e.g. [Barnes, 1997; Coussot et al., 2002; Mujumdar et al.,

2002]). No entanto, a formulação adotada na Eq. (4.54) é definida em função da tensão de cisalhamento, τ , de modo que $f(\tau)$ se anula para $\tau = 0$ e é estritamente crescente quando τ cresce. Essa formulação parece ser mais adequada, uma vez que a causa da quebra da microestrutura é o nível de tensão e não o nível da taxa de deformação [De Souza Mendes, 2009]. Assim, uma definição apropriada da função é:

$$f(\tau) = \frac{(1 - \lambda_{eq})}{\lambda_{eq}}, \quad (4.55)$$

onde os módulos do tensor extra de tensão e do tensor taxa de deformação são, respectivamente,

$$\tau = \left(\frac{1}{2} \text{tr } \boldsymbol{\tau}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \dot{\gamma} = (2 \text{tr } \mathbf{D}^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.56)$$

Combinando as Eqs. (4.54) e (4.55) pode-se obter a equação de evolução para o regime permanente, i.e.,

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \lambda = \frac{1}{t_{eq}} \left[(1 - \lambda) - (1 - \lambda_{eq}) \left(\frac{\lambda}{\lambda_{eq}} \right) \right], \quad (4.57)$$

onde a variação temporal do parâmetro de estrutura, no lado esquerdo da equação, foi desprezado da derivada material, apresentando somente a variação espacial determinada pelo termo de advecção de λ .

Por conseguinte, convém notar que o valor do parâmetro de estrutura, λ , é determinado pelo mecanismo de transporte que aparece na Eq. (4.57). Nesse mecanismo, dependendo do tempo característico, t_{eq} , o nível de estrutura é carregado ao longo do escoamento, esticando ou encolhendo as regiões estruturadas, ou seja, para valores de t_{eq} maiores, maior será a advecção do nível de estrutura do material.

4.6 Resumo das Equações Fundamentais

- *Equação da Conservação de Massa:*

$$\text{div}(\mathbf{u}) = 0. \quad (4.58)$$

- *Equação da Quantidade de Movimento:*

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u} \right) = \text{div}(\mathbf{T}) + \rho \mathbf{g}. \quad (4.59)$$

- *Equações Constitutivas:*

$$\mathbf{T} = -\alpha \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (4.60)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2, \quad (4.61)$$

$$\boldsymbol{\tau}_1 + \theta(\lambda) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 = 2\eta_v(\lambda) \mathbf{D}(\mathbf{u}), \quad (4.62)$$

$$\boldsymbol{\tau}_2 = 2\eta_\infty \mathbf{D}(\mathbf{u}). \quad (4.63)$$

- *Equação de Evolução:*

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \lambda = \frac{1}{t_{eq}} \left[(1 - \lambda) - (1 - \lambda_{eq}) \left(\frac{\lambda}{\lambda_{eq}} \right) \right]. \quad (4.64)$$

5 ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

Neste capítulo é feita uma discussão sobre as formas de adimensionalização das equações do problema. Será abordado tanto as adimensionalizações clássicas e comumente vista na maioria das literaturas, quanto adimensionalizações propostas especificamente para o escopo deste trabalho.

5.1 Parâmetros na Equação da Quantidade de Movimento

A equação da quantidade de movimento declara que

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{g}, \quad (5.1)$$

onde ρ é a massa específica, $D(\cdot)/Dt$ é a derivada material no tempo, p é a pressão, $\boldsymbol{\tau} \equiv \mathbf{T} + p\mathbf{I}$ é o tensor-extra de tensão, \mathbf{T} o campo de tensão, \mathbf{I} é o tensor unitário e \mathbf{g} é uma força de corpo (e.g. gravidade).

A fim de determinar a versão adimensional da equação de balanço acima, o procedimento consiste em empregar quantidades características escolhidas de modo que se adquira uma formulação adimensionalizada da equação. Para isso, as seguintes variáveis são definidas:

$$t^* = \frac{U}{L}t; \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U}; \quad \nabla^* = L\nabla; \quad p^* = \frac{pL}{\eta_c U}; \quad \boldsymbol{\tau}^* = \frac{\boldsymbol{\tau}L}{\eta_c U}, \quad (5.2)$$

onde U , L e η_c são as quantidades características para velocidade, comprimento e viscosidade, respectivamente. Substituindo as variáveis adimensionais, (5.2), em (5.1), tem-se

$$\frac{\rho U^2}{L} \frac{D\mathbf{u}^*}{Dt^*} = -\frac{\eta_c U}{L^2} \nabla^* p^* + \frac{\eta_c U}{L^2} \operatorname{div}^* \boldsymbol{\tau}^* + \frac{\rho g}{L^2} \mathbf{g}, \quad (5.3)$$

onde $g = |\mathbf{g}|$. Multiplicando a Eq. (5.3) por $L^2/(\eta_c U)$, obtém-se a versão adimensional da equação da quantidade de movimento

$$\operatorname{Re} \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla^* p^* + \operatorname{div}^*(\boldsymbol{\tau}^*) + \operatorname{Ga} \frac{\mathbf{g}}{g}. \quad (5.4)$$

Nota-se que surgem dois grupos adimensionais, i.e., o *número de Reynolds* (Re) e o *número de Galilei* (Ga). O número de Reynolds fornece a importância das forças de inércias em

relação as forças viscosas no escoamento:

$$\text{Re} = \frac{\rho U L}{\eta_c}. \quad (5.5)$$

Enquanto que o número de Galilei indica a importância das forças externas em relação as forças viscosas no escoamento:

$$\text{Ga} = \frac{\rho g L^2}{\eta_c U}. \quad (5.6)$$

As definições acima servem apenas como exemplo para o procedimento de adimensionalização das equações. Claramente esse processo não é único, pois depende da escolha dos adimensionais empregados e essas escolhas dependem do tipo específico de problema que se deseja estudar.

5.2 Parâmetros para o comportamento reológico

Existem parâmetros adimensionais que surgem na forma adimensionalizada da equação constitutiva. No comportamento de fluidos newtonianos generalizados, i.e.,

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\dot{\gamma})(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad (5.7)$$

grupos adimensionais aparecem na versão adimensional da função viscosidade.

No caso de fluidos com comportamento viscoplástico, faz-se uso da função viscosidade VPH, usada neste trabalho, i.e.,

$$\eta(\dot{\gamma}) = \left[\frac{1}{\eta_0} + \frac{\dot{\gamma}}{\tau_0 + K\dot{\gamma}^n + \eta_\infty \dot{\gamma}} \right]^{-1}. \quad (5.8)$$

Os parâmetros que aparecem nessa equação são a viscosidade para cisalhamento quase nulo, η_0 ; a tensão limite de escoamento (yield stress), τ_0 ; o índice de consistência, K ; o índice de escoamento, n ; e a viscosidade para cisalhamento infinito, η_∞ . Como indicado na Figura 5.1, existem três transições marcadas por taxas de cisalhamento, na função viscosidade, pertinentes ao contexto do trabalho cuja descrição é

$$\dot{\gamma}_0 = \frac{\tau_0}{\eta_0}; \quad \dot{\gamma}_1 = \left(\frac{\tau_0}{K} \right)^{1/n}; \quad \dot{\gamma}_2 = \left(\frac{K}{\eta_\infty} \right)^{1/(1-n)}. \quad (5.9)$$

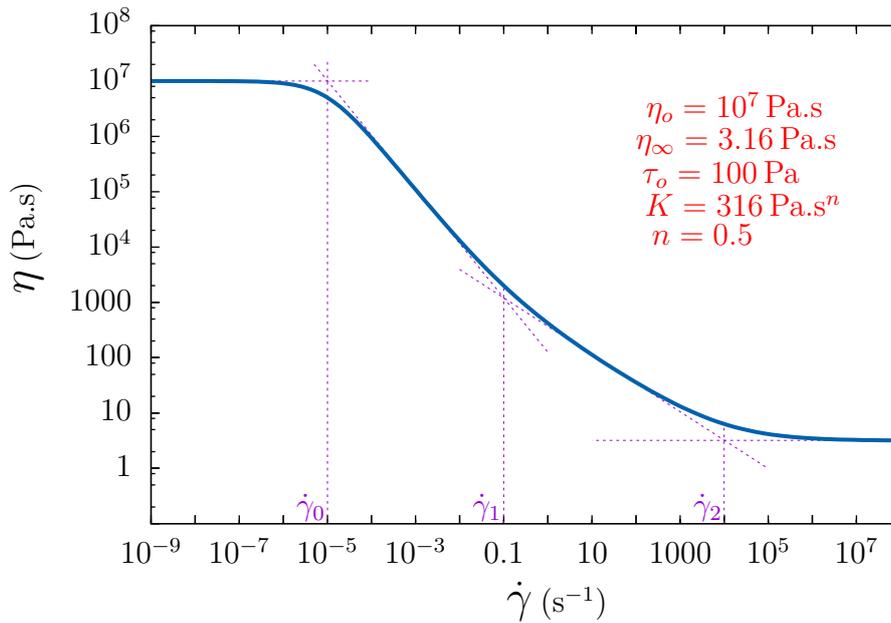


Figura 5.1 – Representação das taxas de cisalhamento na função viscosidade

No escoamento de fluidos não newtonianos a taxa de deformação é uma parte fundamental na análise do escoamento. Desse modo, seguindo a proposta de adimensionalização de [De Souza Mendes, 2007], é necessário definir uma taxa de deformação característica, $\dot{\gamma}_c$, usualmente definida como a razão entre uma velocidade característica, U , e um comprimento característico, L , i.e.,

$$\dot{\gamma}_c \equiv \dot{\gamma}_1 = \frac{U}{L}. \quad (5.10)$$

Quando o escoamento é predominantemente cisalhante, o comprimento característico, L , é o comprimento perpendicular ao escoamento principal, enquanto que em um escoamento predominantemente extensional L deve representar o comprimento na direção do escoamento principal.

As outras quantidades características são obtidas a partir dessas já selecionadas, e.g., a viscosidade característica é obtida calculando a função viscosidade ($\eta(\dot{\gamma})$) na taxa de deformação característica, i.e.,

$$\eta_c \equiv \eta(\dot{\gamma}_1), \quad (5.11)$$

e a tensão característica é construída multiplicando a viscosidade característica pela taxa de deformação característica, i.e. $\tau_c = \eta_c \dot{\gamma}_1$. Um tempo característico para escoamentos

estacionários é $t_c = 1/\dot{\gamma}_1$. Outras quantidades características podem ser obtidas com base nas quantidades já mencionadas.

5.3 Parâmetros para Função VPH

Nesta seção utiliza-se o procedimento de adimensionalização proposto para obter a versão adimensional da função VPH, usada neste trabalho e definida na Eq. 5.8 para fluidos viscoplásticos. A viscosidade adimensional é obtida pela razão entre $\dot{\gamma}_1 \eta(\dot{\gamma})$ e uma tensão característica (τ_c) aqui definida como $\tau_c = \tau_0$. Como anteriormente, a taxa de deformação característica é $\dot{\gamma}_c = \dot{\gamma}_1$, onde $\dot{\gamma}_1$ foi definido na Eq. (5.9). Desse modo, segue que

$$\begin{aligned} \eta^*(\dot{\gamma}^*) &\equiv \frac{\eta(\dot{\gamma})\dot{\gamma}_1}{\tau_0} = \left[\frac{\tau_0}{\eta_0 \dot{\gamma}_1} + \frac{\dot{\gamma} \tau_0}{\tau_0 \dot{\gamma}_1 + K \dot{\gamma}^n \dot{\gamma}_1 + \eta_\infty \dot{\gamma} \dot{\gamma}_1} \right]^{-1} \\ &= \left[\frac{1}{\eta_0^*} + \frac{\dot{\gamma}^* K \dot{\gamma}_1^{n+1}}{K \dot{\gamma}_1^{n+1} + K (\dot{\gamma}^* \dot{\gamma}_1)^n \dot{\gamma}_1 + \eta_\infty \dot{\gamma}^* \dot{\gamma}_1^2} \right]^{-1} \\ &= \left[\frac{1}{\eta_0^*} + \frac{\dot{\gamma}^*}{1 + \dot{\gamma}^{*n} + \eta_\infty \dot{\gamma}^* \dot{\gamma}_1 / \tau_0} \right]^{-1} \end{aligned}$$

onde usou-se $\tau_0 = K \dot{\gamma}_1^n$ e $\dot{\gamma}^* = \dot{\gamma} / \dot{\gamma}_1$. Logo,

$$\eta^*(\dot{\gamma}^*) = \left[\frac{1}{\eta_0^*} + \frac{\dot{\gamma}^*}{1 + \dot{\gamma}^{*n} + \eta_\infty^* \dot{\gamma}^*} \right]^{-1} \quad (5.12)$$

Os parâmetros adimensionais que surgem são definidos em seguida como,

$$\eta_0^* = \frac{\eta_0 \dot{\gamma}_1}{\tau_0}; \quad \eta_\infty^* = \frac{\eta_\infty \dot{\gamma}_1}{\tau_0}. \quad (5.13)$$

É importante notar que os parâmetros adimensionais envolvem apenas quantidades reológicas e, portanto, são por si próprios propriedades reológicas. Além disso, a viscosidade adimensional é mostrada na Figura 5.2, onde η_0^* e η_∞^* representam seus valores de máximo e mínimo, respectivamente.

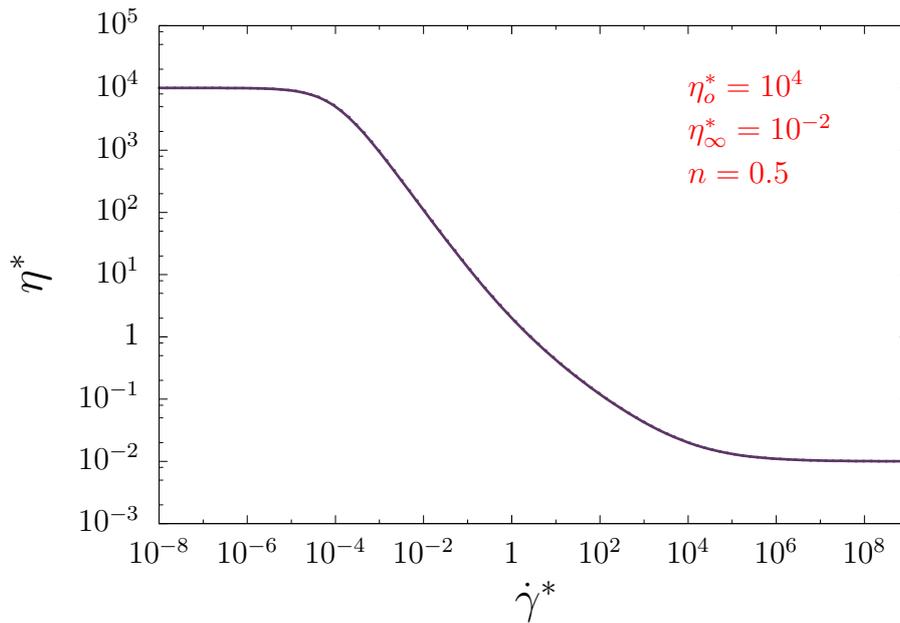


Figura 5.2 – Função viscosidade harmônica adimensional para fluidos viscoplásticos

Assim, um conjunto de variáveis adimensionais é introduzido a seguir.

$$t^* = t\dot{\gamma}_1; \quad \mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L}; \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{\dot{\gamma}_1 L}; \quad \dot{\gamma}^* = \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_1}; \quad (5.14)$$

$$P^* = \frac{P}{\tau_0}; \quad \boldsymbol{\tau}^* = \frac{\boldsymbol{\tau}}{\tau_0}; \quad \eta^*(\dot{\gamma}^*) = \frac{\eta(\dot{\gamma})}{\tau_0/\dot{\gamma}_1}. \quad (5.15)$$

A partir dessas variáveis e um pouco de manipulação algébrica, apresenta-se a forma adimensional das equações descritas na Seção 4.6, como

$$\operatorname{div}^* \mathbf{u}^* = 0, \quad \text{em } \Omega^*, \quad (5.16)$$

$$\mathbf{0} = -\nabla^* P^* + \operatorname{div}^*(2\eta_\infty^* \mathbf{D}^*(\mathbf{u}^*)) + \operatorname{div}^* \boldsymbol{\tau}^*, \quad \text{em } \Omega^*, \quad (5.17)$$

$$\boldsymbol{\tau}^* + \theta^*(\lambda) \nabla^* \boldsymbol{\tau}^* = 2\eta_v^*(\lambda) \mathbf{D}^*(\mathbf{u}^*), \quad \text{em } \Omega^*, \quad (5.18)$$

$$\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \lambda = \frac{1}{t_{eq}^*} \left[(1 - \lambda) - (1 - \lambda_{eq}) \left(\frac{\lambda}{\lambda_{eq}} \right) \right], \quad \text{em } \Omega^*, \quad (5.19)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{U}^*, \quad \text{em } \Gamma^{\mathbf{u}^*}, \quad (5.20)$$

onde $\theta^*(\lambda) = \theta(\lambda)\dot{\gamma}_1$ é o tempo de relaxação adimensional. Se levar em conta a definição do tempo de relaxação, na Eq. (4.49), pode-se ainda definir o parâmetro elástico adimensional

do fluido totalmente estruturado θ_0^* , i.e.,

$$\theta_0^* \equiv \theta^*(1) = \frac{\eta_0 \dot{\gamma}_1}{G_0}, \quad (5.21)$$

e ainda,

$$G_s^*(\lambda) = G_0^* \exp \left[m \left(\frac{1}{\lambda} - 1 \right) \right], \quad (5.22)$$

a função módulo de elasticidade adimensional.

6 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

Neste capítulo realiza-se a discretização das equações introduzidas no capítulo 4 como forma de descrever a utilização do Método de Elementos Finitos para tratar a solução das Equações de Navier-Stokes quando aplicada a modelagem de fluidos não newtonianos.

Considere $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ o domínio do modelo com fronteira Γ . O problema é dado por um conjunto de equações acopladas do qual consiste em encontrar $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (u_1(\mathbf{x}), u_2(\mathbf{x})) \in C^2(\Omega)^2$, $P(\mathbf{x}) \in C^1(\Omega)$, $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \in C^1(\Omega)$ e $\lambda(\mathbf{x}) \in C^1(\Omega)$ satisfazendo

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0, \quad \text{em } \Omega, \quad (6.1)$$

$$\rho(\nabla \mathbf{u})\mathbf{u} = -\nabla P + \operatorname{div}(2\eta_\infty \mathbf{D}(\mathbf{u})) + \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}), \quad \text{em } \Omega, \quad (6.2)$$

$$\boldsymbol{\tau} + \theta(\lambda) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_v(\lambda) \mathbf{D}(\mathbf{u}), \quad \text{em } \Omega, \quad (6.3)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \lambda = \frac{1}{t_{eq}} \left[(1 - \lambda) - (1 - \lambda_{eq}) \left(\frac{\lambda}{\lambda_{eq}} \right) \right], \quad \text{em } \Omega, \quad (6.4)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0, \quad \text{em } \Gamma_g, \quad (6.5)$$

onde \mathbf{u} é o vetor de velocidade do escoamento, $P \equiv \alpha + \rho\phi$ é a pressão modificada, com $\mathbf{g} = -\nabla\phi$, $\boldsymbol{\tau}$ é o campo de tensão e λ é o parâmetro de estrutura. A Eq. (6.5) é uma condição de contorno prescrita¹.

6.1 Formulação Variacional

Para obter a discretização do problema em questão é necessário, primeiramente, obter a formulação variacional ou forma fraca das equações. Para isso, define-se os espaços de funções

$$\mathbf{V} = \{ \mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2 \mid \mathbf{v} \in H^1(\Omega)^2 \text{ e } \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ em } \Gamma \} = H_0^1(\Omega)^2, \quad (6.6)$$

$$Q = \left\{ q : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid q \in L^2(\Omega), \int_{\Omega} q d\Omega = 0 \right\} = L_0^2(\Omega), \quad (6.7)$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \{ \mathbf{S} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2} \mid \mathbf{S} \in L^2(\Omega)^{2 \times 2} \} = L^2(\Omega)^{2 \times 2}, \quad (6.8)$$

$$\Lambda = \{ \xi : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \xi \in H^1(\Omega) \} = H^1(\Omega). \quad (6.9)$$

A formulação variacional das equações (6.1)-(6.4) é obtida integrando essas equações multiplicadas por conjunto de funções testes \mathbf{v} , q , \mathbf{S} e ξ pertencentes ao mesmo espaço de \mathbf{u} , P , $\boldsymbol{\tau}$ e Λ , respectivamente. Esse processo será demonstrado para cada uma das

¹Esse tipo de condição de contorno é conhecida como condição de Dirichlet, ou de 2º espécie.

equações governantes destacadas anteriormente.

- EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DE MASSA: Multiplica-se por uma função teste, $q \in Q$, a equação que define a conservação de massa.

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u})q d\Omega = 0, \quad \forall q \in Q \quad (6.10)$$

- EQUAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO: Para esse caso, multiplica-se por uma função teste $\mathbf{v} \in \mathbf{V}$ cada um dos termos da equação, como será visto separadamente.

- PARA O TERMO DE INÉRCIA:

$$\int_{\Omega} \rho[(\nabla \mathbf{u})\mathbf{u}] \cdot \mathbf{v} d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad (6.11)$$

- PARA O GRADIENTE DE PRESSÃO:

$$\int_{\Omega} -\nabla P \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} P \operatorname{div}(\mathbf{v}) d\Omega - \int_{\Omega} \operatorname{div}(P\mathbf{v}) d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V},$$

pelo Teorema 2.2, tem-se

$$\int_{\Omega} -\nabla P \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} P \operatorname{div}(\mathbf{v}) d\Omega - \int_{\Gamma} P\mathbf{v} \cdot \mathbf{nd}\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V},$$

sabendo que $\mathbf{v} = 0$ em Γ , tem-se

$$\int_{\Omega} -\nabla P \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} P \operatorname{div}(\mathbf{v}) d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \quad (6.12)$$

- PARA AS FORÇAS VISCOSAS: Por simplicidade, despreza-se a constante $2\eta_{\infty}$,

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{D}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{v}) d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V},$$

onde no primeiro termo após a igualdade é usada a contração de tensores, definida no Apêndice A.1. Pelo Teorema 2.2, tem-se

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{D}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma} [\mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{v}] \cdot \mathbf{nd}\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V},$$

sabendo que $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ em Γ , tem-se

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{D}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v} d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \quad (6.13)$$

No entanto, como

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v} &= \frac{1}{2}[\mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v} + \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v}] = \frac{1}{2}[\mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v} + \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v}^T], \\ \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \nabla \mathbf{v} &= \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}(\mathbf{v}),\end{aligned}\quad (6.14)$$

a equação (6.13) pode ser reescrita como

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{D}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}(\mathbf{v}) d\Omega, \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \quad (6.15)$$

◦ PARA O TERMO DE TENSÃO:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau} \mathbf{v}) d\Omega, \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}$$

pelo Teorema 2.2 sabendo que $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ em Γ , tem-se

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} d\Omega, \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \quad (6.16)$$

analogamente ao descrito na equação (6.14), pode-se rescrever a equação (6.16), como

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{D}(\mathbf{v}) d\Omega, \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \quad (6.17)$$

- EQUAÇÃO CONSTITUTIVA: Multiplica-se por uma função teste $\mathbf{S} \in \boldsymbol{\Sigma}$, cada um dos termos da equação.

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{S} + \theta(\lambda) \overline{\boldsymbol{\tau}} : \mathbf{S} d\Omega = \int_{\Omega} 2\eta_v(\lambda) \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \mathbf{S} d\Omega, \quad \forall \mathbf{S} \in \boldsymbol{\Sigma}. \quad (6.18)$$

- EQUAÇÃO DE EVOLUÇÃO: Multiplica-se por uma função teste $\xi \in \Lambda$, ambos lados da equação.

$$\int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla \lambda) \xi d\Omega = \int_{\Omega} t_{eq}^{-1} \left[(1 - \lambda) - (1 - \lambda_{eq}) \left(\frac{\lambda}{\lambda_{eq}} \right) \right] \xi d\Omega, \quad \forall \xi \in \Lambda. \quad (6.19)$$

Desse modo, usando a notação de produto interno, a formulação variacional para

o problema em questão consiste em encontrar $(\mathbf{u}, P, \boldsymbol{\tau}, \lambda) \in (\mathbf{V}, Q, \boldsymbol{\Sigma}, \Lambda)$, tal que

$$\langle \operatorname{div}(\mathbf{u}), q \rangle = 0, \quad \forall q \in Q \quad (6.20)$$

$$\rho \langle (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \langle P, \operatorname{div}(\mathbf{v}) \rangle - 2\eta_\infty \langle \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{D}(\mathbf{v}) \rangle - \langle \boldsymbol{\tau}, \mathbf{D}(\mathbf{v}) \rangle, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad (6.21)$$

$$\langle \boldsymbol{\tau}, \mathbf{S} \rangle + \langle \theta(\lambda) \overline{\boldsymbol{\tau}}, \mathbf{S} \rangle = \langle 2\eta_v(\lambda) \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{S} \rangle, \quad \forall \mathbf{S} \in \boldsymbol{\Sigma} \quad (6.22)$$

$$\langle \mathbf{u} \cdot \nabla \lambda, \xi \rangle = \langle t_{eq}^{-1} \left[(1 - \lambda) - (1 - \lambda_{eq}) \left(\frac{\lambda}{\lambda_{eq}} \right) \right], \xi \rangle, \quad \forall \xi \in \Lambda. \quad (6.23)$$

As equações (6.20)-(6.23) descrevem a formulação variacional, através de um conjunto de equações. Essa formulação é totalmente equivalente à forma dada por uma única equação, como segue. Encontre $(\mathbf{u}, P, \boldsymbol{\tau}, \lambda) \in (\mathbf{V}, Q, \boldsymbol{\Sigma}, \Lambda)$, tal que

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, P, \boldsymbol{\tau}, \lambda; \mathbf{v}, q, \mathbf{S}, \xi) = \mathcal{G}, \quad \forall (\mathbf{v}, q, \mathbf{S}, \xi) \in (\mathbf{V}, Q, \boldsymbol{\Sigma}, \Lambda), \quad (6.24)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{B}(\mathbf{u}, P, \boldsymbol{\tau}, \lambda; \mathbf{v}, q, \mathbf{S}, \xi) &= \rho \langle (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle - \langle P, \operatorname{div}(\mathbf{v}) \rangle + 2\eta_\infty \langle \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{D}(\mathbf{v}) \rangle + \langle \boldsymbol{\tau}, \mathbf{D}(\mathbf{v}) \rangle \\ &\quad - \langle \operatorname{div}(\mathbf{u}), q \rangle + \langle \boldsymbol{\tau}, \mathbf{S} \rangle + \langle \theta(\lambda) \overline{\boldsymbol{\tau}}, \mathbf{S} \rangle - \langle 2\eta_v(\lambda) \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{S} \rangle \\ &\quad + \langle \mathbf{u} \cdot \nabla \lambda, \xi \rangle + \left\langle \left(t_{eq}^{-1} + \frac{t_{eq}^{-1}(1 - \lambda_{eq})}{\lambda_{eq}} \right) \lambda, \xi \right\rangle \end{aligned} \quad (6.25)$$

e

$$\mathcal{G} = \langle t_{eq}^{-1}, \xi \rangle. \quad (6.26)$$

6.2 Método de Elementos Finitos

No método de elementos finitos, busca-se uma solução aproximada $\mathbf{u}^h, P^h, \boldsymbol{\tau}^h, \lambda^h$ em seus respectivos subespaços de dimensão finita $\mathbf{V}^h, Q^h, \boldsymbol{\Sigma}^h, \Lambda^h$ dos espaços $\mathbf{V}, Q, \boldsymbol{\Sigma}, \Lambda$ que possuem dimensão infinita. As soluções $\mathbf{u}^h, P^h, \boldsymbol{\tau}^h$ e λ^h são exclusivamente polinomiais por partes e não necessariamente do mesmo grau [Johnson, 1987]. Desse modo, a partir da formulação variacional (6.20)-(6.23), o método de elementos finitos é formulado como: Encontre $(\mathbf{u}^h, P^h, \boldsymbol{\tau}^h, \lambda^h) \in (\mathbf{V}^h, Q^h, \boldsymbol{\Sigma}^h, \Lambda^h)$ tal que

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}^h, P^h, \boldsymbol{\tau}^h, \lambda^h; \mathbf{v}^h, q^h, \mathbf{S}^h, \xi^h) = \mathcal{G}, \quad \forall (\mathbf{v}^h, q^h, \mathbf{S}^h, \xi^h) \in (\mathbf{V}^h, Q^h, \boldsymbol{\Sigma}^h, \Lambda^h). \quad (6.27)$$

As componentes da velocidade, pressão, tensor extra de tensão e parâmetro de

estrutura são aproximadas por expansões da forma

$$u_i^h(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M \Phi_m(\mathbf{x}) u_i^m = \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_i, \quad (6.28)$$

$$P^h(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^N \Psi_n(\mathbf{x}) P_n = \mathbf{\Psi}^T \mathbf{P}, \quad (6.29)$$

$$\tau_{ij}^h(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \Pi^k(\mathbf{x}) \tau_{ij}^k = \mathbf{\Pi}^T \boldsymbol{\tau}_{ij}, \quad (6.30)$$

$$\lambda^h(\mathbf{x}) = \sum_{l=1}^L \Xi_l(\mathbf{x}) \lambda_l = \mathbf{\Xi}^T \boldsymbol{\lambda}, \quad (6.31)$$

onde $\mathbf{\Psi}$, $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Pi}$ e $\mathbf{\Xi}$ são vetores das funções base, \mathbf{u}_i , \mathbf{P} , $\boldsymbol{\tau}_{ij}$ e $\boldsymbol{\lambda}$ são os vetores de nós desconhecidos, e M , N , K e L indicam, neste contexto, o número de graus de liberdade.

Para escrever o conjunto de equações obtido através das aproximações (6.28)-(6.31), na formulação variacional discreta dada por (6.27), será utilizado a notação indicial detalhada no Apêndice A.1. Desse modo, o seguinte sistema de equações pode ser obtido

EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DE MASSA:

$$\langle \mathbf{\Psi}, \mathbf{\Phi}_{,i}^T \rangle \mathbf{u}_i = 0. \quad (6.32)$$

EQUAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO:

$$\begin{aligned} \rho \langle \mathbf{\Phi}, \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_j \mathbf{\Phi}_{,j}^T \rangle \mathbf{u}_i + \eta_\infty \langle \mathbf{\Phi}_{,j}, \mathbf{\Phi}_{,j}^T \rangle \mathbf{u}_i + \frac{\eta_\infty}{2} \langle \mathbf{\Phi}_{,i}, \mathbf{\Phi}_{,j}^T \rangle \mathbf{u}_i + \frac{\eta_\infty}{2} \langle \mathbf{\Phi}_{,j}, \mathbf{\Phi}_{,i}^T \rangle \mathbf{u}_j \\ - \langle \mathbf{\Phi}_{,i}, \mathbf{\Psi}^T \rangle \mathbf{P} + \frac{1}{2} \langle \mathbf{\Phi}_{,j}, \mathbf{\Pi}^T \rangle \boldsymbol{\tau}_{ij} + \frac{1}{2} \langle \mathbf{\Phi}_{,i}, \mathbf{\Pi}^T \rangle \boldsymbol{\tau}_{ij} = 0 \end{aligned} \quad (6.33)$$

EQUAÇÃO DE CONSTITUTIVA:

$$\langle \mathbf{\Pi}, \mathbf{\Pi}^T \rangle \boldsymbol{\tau}_{ij} + \langle \theta(\lambda) \mathbf{\Pi}, \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_{ij} \rangle - \langle \eta_v(\lambda) \mathbf{\Pi}, \mathbf{\Phi}_{,j}^T \rangle \mathbf{u}_i - \langle \eta_v(\lambda) \mathbf{\Pi}, \mathbf{\Phi}_{,i}^T \rangle \mathbf{u}_j = 0 \quad (6.34)$$

Note que o termo que representa a derivada convectada superior não é escrito, devido sua complexidade. As suas componentes bidimensionais são dada em seguida, em termos das funções de elementos finitos.

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_{11} = \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_1 \mathbf{\Pi}_{,1}^T \tau_{11} + \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_2 \mathbf{\Pi}_{,2}^T \tau_{11} - 2 \mathbf{\Phi}_{,1}^T \mathbf{u}_1 \mathbf{\Pi}^T \tau_{11} - 2 \mathbf{\Phi}_{,2}^T \mathbf{u}_1 \mathbf{\Pi}^T \tau_{12} \quad (6.35)$$

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_{22} = \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_1 \mathbf{\Pi}_{,1}^T \tau_{22} + \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_2 \mathbf{\Pi}_{,2}^T \tau_{22} - 2 \mathbf{\Phi}_{,1}^T \mathbf{u}_2 \mathbf{\Pi}^T \tau_{12} - 2 \mathbf{\Phi}_{,2}^T \mathbf{u}_2 \mathbf{\Pi}^T \tau_{22} \quad (6.36)$$

$$\begin{aligned} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_{12} = \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_1 \mathbf{\Pi}_{,1}^T \tau_{12} + \mathbf{\Phi}^T \mathbf{u}_2 \mathbf{\Pi}_{,2}^T \tau_{12} - \mathbf{\Phi}_{,1}^T \mathbf{u}_2 \mathbf{\Pi}^T \tau_{11} - \mathbf{\Phi}_{,2}^T \mathbf{u}_1 \mathbf{\Pi}^T \tau_{22} \\ - (\mathbf{\Phi}_{,1}^T \mathbf{u}_1 + \mathbf{\Phi}_{,2}^T \mathbf{u}_2) \mathbf{\Pi}^T \tau_{12}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

EQUAÇÃO DE EVOLUÇÃO:

$$\langle \Xi, \phi^T \mathbf{u}_i \Xi_i^T \rangle \boldsymbol{\lambda} + \langle \Xi, t_{eq}^{-1} (1 + (1 - \lambda_{eq}) \lambda_{eq}^{-1}) \Xi^T \rangle \boldsymbol{\lambda} = \langle t_{eq}^{-1}, \Xi \rangle \quad (6.38)$$

Uma vez conhecidas as funções de interpolação Φ , Ψ , Π e Ξ (e.g. funções polinomiais lineares) e a geometria do elemento (i.e. x_i), então as integrais (6.32)-(6.34) podem ser calculadas para produzir as matrizes de coeficientes. As integrais são calculadas por um processo de quadratura numérica (e.g Gauss-Legendre). Com isso, o sistema discreto é dado pela seguinte matriz de equações:

As equações da quantidade de movimento e conservação de massa são escritas em um único sistema, dado por

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_i(\mathbf{u}_i) & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_i(\mathbf{u}_i) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{P} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2\mathbf{K}_{11} + \mathbf{K}_{22} & \mathbf{K}_{21} & \mathbf{Q}_1 \\ \mathbf{K}_{12} & \mathbf{K}_{11} + 2\mathbf{K}_{22} & \mathbf{Q}_2 \\ \mathbf{Q}_1^T & \mathbf{Q}_2^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{P} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{R}_2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}_2 & \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{11} \\ \tau_{22} \\ \tau_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (6.39)$$

para a equação constitutiva,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{N} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{11} \\ \tau_{22} \\ \tau_{12} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2\mathbf{D}_1(\mathbf{u}_1) & \mathbf{0} & 2\mathbf{D}_2(\mathbf{u}_1) \\ \mathbf{0} & 2\mathbf{D}_2(\mathbf{u}_2) & 2\mathbf{D}_1(\mathbf{u}_2) \\ \mathbf{D}_1(\mathbf{u}_2) & \mathbf{D}_2(\mathbf{u}_1) & \mathbf{D}_i(\mathbf{u}_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{11} \\ \tau_{22} \\ \tau_{12} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{C}_i^*(\mathbf{u}_i) & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_i^*(\mathbf{u}_i) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{C}_i^*(\mathbf{u}_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \tau_{22} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \tau_{12} & \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (6.40)$$

e para a equação de evolução,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{S}_1(\mathbf{u}_1) + \mathbf{S}_2(\mathbf{u}_2) \end{bmatrix} \{ \lambda \} + \begin{bmatrix} \mathbf{W} \end{bmatrix} \{ \lambda \} = \{ \mathbf{G} \}, \quad (6.41)$$

onde os índices repetidos indicam uma soma e os coeficientes são definidos por

$$\mathbf{C}_i(\mathbf{u}_j) = \rho \langle \Phi, \Phi^T \mathbf{u}_j \Phi_i^T \rangle, \quad \mathbf{K}_{ij} = \eta_\infty \langle \Phi_{,i}, \Phi_{,j}^T \rangle, \quad \mathbf{Q}_i = -\langle \Phi_{,i}, \Psi^T \rangle, \quad \mathbf{R}_i = \langle \Phi_{,i}, \Pi^T \rangle, \quad (6.42)$$

$$\mathbf{N} = \langle \Pi, \Pi^T \rangle, \quad \mathbf{C}_i^*(\mathbf{u}_j) = \langle \theta(\lambda) \Pi, \Phi^T \mathbf{u}_j \Pi_i^T \rangle, \quad \mathbf{D}_i(\mathbf{u}_j) = \langle \theta(\lambda) \Pi, \Phi_{,i}^T \mathbf{u}_j \Pi^T \rangle, \quad \mathbf{L}_i = \langle \eta_v(\lambda) \Pi, \Phi_{,i}^T \rangle, \quad (6.43)$$

$$\mathbf{S}_i(\mathbf{u}_j) = \langle \Xi, \phi^T \mathbf{u}_j \Xi_i^T \rangle, \quad \mathbf{W} = \langle \Xi, t_{eq}^{-1} (1 + (1 - \lambda_{eq}) \lambda_{eq}^{-1}) \Xi^T \rangle, \quad \mathbf{G} = \langle t_{eq}^{-1}, \Xi \rangle. \quad (6.44)$$

Finalmente, o sistema (6.39)-(6.41) pode ser expresso simbolicamente como

$$\mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{U} + \mathbf{K}\mathbf{U} + \mathbf{R}\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}, \quad (6.45)$$

$$\mathbf{N}\boldsymbol{\tau} - \mathbf{D}(\mathbf{u})\boldsymbol{\tau} + \mathbf{C}^*(\mathbf{u})\boldsymbol{\tau} - \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{0}, \quad (6.46)$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{u})\boldsymbol{\lambda} + \mathbf{W}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{G}, \quad (6.47)$$

onde $\mathbf{U}^T = \{\mathbf{u}_1^T, \mathbf{u}_2^T, \mathbf{P}^T\}$. As equações (6.45)-(6.47) representam as equações de elementos finitos modeladas para um fluido elasto-viscoplástico com tixotropia e em regime permanente. A discussão de casos onde envolve dependência temporal não serão tratadas neste trabalho. O sistema de matrizes proposto é acoplado e altamente não-linear. A equação (6.45) é conhecida como a forma padrão para um problema newtoniano com a adição de $\mathbf{R}\boldsymbol{\tau}$ que vem do campo de tensão [Reddy e Gartling, 2010]. A equação (6.46) representa a equação constitutiva implícita e é vista como uma equação de advecção para o tensor-extra de tensão. A equação (6.47) é a forma simbólica da equação de evolução e está acoplada ao campo de velocidade.

6.3 Método de Galerkin Mínimos Quadrados

O método de Galerkin Mínimos Quadrados (GLS, sigla em inglês) foi originalmente desenvolvido para o problema de Stokes [Hughes et al., 1986]. A ideia do método GLS consiste em contornar problemas de incompatibilidade entre os espaços de funções que não satisfazem a *condição inf-sup* (ou *condição LBB*), adicionando termos extras à formulação variacional discreta. A importância de condições desse tipo na teoria de equações elípticas e suas aproximações foi primeiro demonstrado por Babuška, 1971. Em seguida, um trabalho que ajudou nessa área foi o importante artigo de Brezzi, 1974. Uma condição similar para o caso especial do problema de Stokes com incompressibilidade foi estudado por [Ladyzhenskaya, 1969]. Assim, condições no contexto de escoamentos incompressíveis são referenciados como *Condição LBB* (Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi) [Oden, 1982].

Na literatura, existem várias versões do Método GLS, e.g. [Behr et al., 1993; Fan et al., 1999], mas o método utilizado neste trabalho foi proposto por Franca e Frey, 1992, e consiste em adicionar termos de estabilização na equação (6.27), a fim de manter a mesma ordem dos polinômios que aproximam os campos de velocidade, pressão e tensão.

A aproximação de Galerkin Mínimos Quadrados para o problema definido por

(6.27) pode ser formulada como: Encontre $(\mathbf{u}^h, P^h, \boldsymbol{\tau}^h, \lambda^h) \in (\mathbf{V}^h, Q^h, \boldsymbol{\Sigma}^h, \Lambda^h)$ tal que,

$$\mathcal{B}_{gls}(\mathbf{u}^h, P^h, \boldsymbol{\tau}^h, \lambda^h; \mathbf{v}^h, q^h, \mathbf{S}^h, \xi^h) = \mathcal{G}_{gls}(\mathbf{v}^h, q^h, \mathbf{S}^h, \xi^h), \quad (6.48)$$

para todo $(\mathbf{v}^h, q^h, \mathbf{S}^h, \xi^h) \in (\mathbf{V}^h, Q^h, \boldsymbol{\Sigma}^h, \Lambda^h)$, onde

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{gls}(\mathbf{u}^h, P^h, \boldsymbol{\tau}^h, \lambda^h; \mathbf{v}^h, q^h, \mathbf{S}^h, \xi^h) &= \rho \langle (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h \rangle - \langle P^h, \operatorname{div}(\mathbf{v}^h) \rangle + 2\eta_\infty \langle \mathbf{D}(\mathbf{u}^h), \mathbf{D}(\mathbf{v}^h) \rangle \\ &+ \langle \boldsymbol{\tau}^h, \mathbf{D}(\mathbf{v}^h) \rangle - \langle \operatorname{div}(\mathbf{u}^h), q^h \rangle - \epsilon \langle P^h, q^h \rangle + \langle \boldsymbol{\tau}^h, \mathbf{S}^h \rangle + \langle \theta \boldsymbol{\tau}^{\nabla h}, \mathbf{S}^h \rangle - \langle 2\eta_v \mathbf{D}(\mathbf{u}^h), \mathbf{S}^h \rangle \\ &+ \langle \mathbf{u}^h \cdot \nabla \lambda^h, \xi \rangle + \langle (t_{eq}^{-1}(1 + (1 - \lambda_{eq})\lambda_{eq}^{-1}) \lambda^h, \xi^h) \rangle \\ &+ \delta(\operatorname{Re}_K) \langle \operatorname{div}(\mathbf{v}^h), \operatorname{div}(\mathbf{u}^h) \rangle + \sum_{K \in \Omega^h} \alpha(\operatorname{Re}_K) \langle \rho(\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{u}^h + \nabla P^h - \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}^h) \\ &- 2\eta_\infty \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{u}^h), \rho(\nabla \mathbf{v}^h) \mathbf{u}^h + \nabla q^h - \operatorname{div}(\mathbf{S}^h) - 2\eta_\infty \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{v}^h) \rangle|_K \\ &+ \beta \langle \boldsymbol{\tau}^h + \theta \boldsymbol{\tau}^{\nabla h} - 2\eta_v \mathbf{D}(\mathbf{u}^h), \mathbf{S}^h + \theta \mathbf{S}^{\nabla h} - 2\eta_v \mathbf{D}(\mathbf{v}^h) \rangle \\ &+ \omega \langle \mathbf{u}^h \cdot \nabla \lambda^h + (t_{eq}^{-1}(1 + (1 - \lambda_{eq})\lambda_{eq}^{-1}) \lambda^h, \mathbf{u}^h \cdot \nabla \xi^h \\ &+ (t_{eq}^{-1}(1 + (1 - \lambda_{eq})\lambda_{eq}^{-1}) \xi^h) \rangle. \end{aligned} \quad (6.49)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{gls}(\mathbf{v}^h, q^h, \mathbf{S}^h, \xi^h) &= \langle t_{eq}^{-1}, \xi^h \rangle + \sum_{K \in \Omega^h} \omega \langle t_{eq}^{-1}, \mathbf{u}^h \cdot \nabla \xi^h \\ &+ (t_{eq}^{-1}(1 + (1 - \lambda_{eq})\lambda_{eq}^{-1}) \xi^h) \rangle|_K. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Note que $K \in \Omega^h$ subscrito na equação anterior representa uma operação sobre cada elemento (triangular ou quadrangular) da discretização, β e ω são valores arbitrários maiores que zero [Behr et al., 1993]. O termo que multiplica ϵ ($\ll 1$) é adicionado a fim de obter uma formulação mais regular, no sentido computacional². O número de Reynolds de malha, Re_K , e os parâmetros de estabilização $\alpha(\operatorname{Re}_K)$ e $\delta(\operatorname{Re}_K)$ são definidos como em Behr et al., 1993.

²A adição desse termo na formulação discreta também conhecido como Método da Penalidade (Penalty Method).

$$\text{Re}_K = \frac{\rho h_K \|\mathbf{u}^h\|_0 m_k}{4\eta_e(\dot{\gamma})}, \quad (6.51)$$

$$\alpha(\text{Re}_K) = \frac{h_K}{2\|\mathbf{u}^h\|_0} \zeta(\text{Re}_K), \quad (6.52)$$

$$\delta(\text{Re}_K) = \lambda_d \|\mathbf{u}^h\|_0 h_K \zeta(\text{Re}_K), \quad (6.53)$$

$$\zeta(\text{Re}_K) = \begin{cases} \text{Re}_K, & 0 < \text{Re}_K < 1 \\ 1, & \text{Re}_K > 1 \end{cases}, \quad (6.54)$$

$$\|\mathbf{u}^h\|_0 = \left(\sum_{i=1}^N |u_i^h|^2 \right)^{1/2}, \quad (6.55)$$

$$m_k = \min \left\{ \frac{1}{3}, 2C_k \right\}, \quad (6.56)$$

$$C_k \sum_{K \in \Omega^h} h_K^2 \|\text{div}(\mathbf{S}^h)\|_{0,K}^2 \geq \|\mathbf{S}^h\|_0^2, \quad \forall \mathbf{S}^h \in \boldsymbol{\Sigma}^h, \quad (6.57)$$

onde $\|\cdot\|_{0,K}$ denota a norma $L^2(\Omega)$ restrita a um elemento K da discretização, λ_d é um parâmetro positivo e h_K é o comprimento de malha.

7 RESULTADOS

Neste capítulo são discutidos alguns resultados numéricos obtidos através da formulação de elementos finitos estabilizada, descrita anteriormente. A ideia é avaliar o comportamento de um escoamento em uma contração abrupta, na escala 4:1, de um fluido elasto-viscoplástico tixotrópico através de simulações numéricas e o uso da nova função Viscoplastica Harmônica (VPH).

As simulações computacionais foram realizadas com uso do código NNFEM em linguagem Fortran 90, desenvolvido pelo Laboratório de Mecânica dos Fluidos Aplicada e Computacional (LAMAC), do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), além da infraestrutura do grupo *Complex Flows of Complex Fluids* (CF2) do *Department of Chemical and Biomolecular Engineering* (CHBe) da Rice University (Houston, Texas - EUA) que proporcionou uma grande agilidade na obtenção de resultados pela viabilização do uso do Cluster *DaVinci*, gerenciado pela própria Rice.

Antes de introduzir os resultados da tese, nas seções seguintes são expostos problemas que inspiraram a abordagem numérica deste trabalho. Para isso, na seção 7.1 são resgatados resultados de comparação da simulação computacional de um problema newtoniano em uma cavidade unitária, a fim de validar o código computacional. Na seção 7.2, a simulação de problema elasto-viscoplástico também é realizada para fins de comparação qualitativa com a literatura disponível. Finalmente, na seção 7.3 são apresentados os resultados da tese com a simulação em uma contração abrupta de um problema elasto-viscoplástico tixotrópico.

7.1 Verificação do código

A validação será feita retrocedendo um passo e analisando a formulação GLS das equações de Navier-Stokes para caso onde se tem somente velocidade e pressão como variáveis primais, garantindo que as soluções possam ser comparadas com a literatura. Desse modo, a formulação consiste em:

Encontrar $(\mathbf{u}^h, p^h) \in (\mathbf{V}^h, Q^h)$ tal que

$$\begin{aligned}
& \rho \langle (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h \rangle - \langle p^h, \operatorname{div}(\mathbf{v}^h) \rangle + 2\eta \langle \mathbf{D}(\mathbf{u}^h), \mathbf{D}(\mathbf{v}^h) \rangle - \langle \operatorname{div}(\mathbf{u}^h), q^h \rangle \\
& - \epsilon \langle p^h, q^h \rangle + \sum_{K \in \Omega^h} \alpha(\operatorname{Re}_K) \langle \rho (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{u}^h + \nabla P^h - 2\eta \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{u}^h), \\
& \rho (\nabla \mathbf{v}^h) \mathbf{u}^h + \nabla q^h - 2\eta \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{v}^h) \rangle|_K = 0, \quad \forall (\mathbf{v}^h, q^h) \in (\mathbf{V}^h, Q^h), \quad (7.1)
\end{aligned}$$

onde $\alpha(\operatorname{Re}_K)$ é definido em (6.52). A formulação descrita em (7.1) é usada para simular o clássico problema da cavidade, onde a geometria e condições de contorno do problema estão descritas na Figura 7.1, utilizando um sistema de coordenadas retangulares com origem no canto inferior esquerdo da cavidade unitária ($L = 1$). As condições de contorno foram impostas considerando velocidade nula nas paredes ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) e no topo da cavidade admite-se velocidade constante, $u_1 = U$, na direção x , e velocidade nula, $u_2 = 0$, na direção y . O domínio computacional é composto por 10000 elementos (100×100) bilineares (Q_1/Q_1) com um total de 10201 pontos nodais (ou graus de liberdade). Os casos são analisados de acordo com a variação do número de Reynolds, i.e., $\operatorname{Re} = 0$, $\operatorname{Re} = 400$ e $\operatorname{Re} = 1000$.

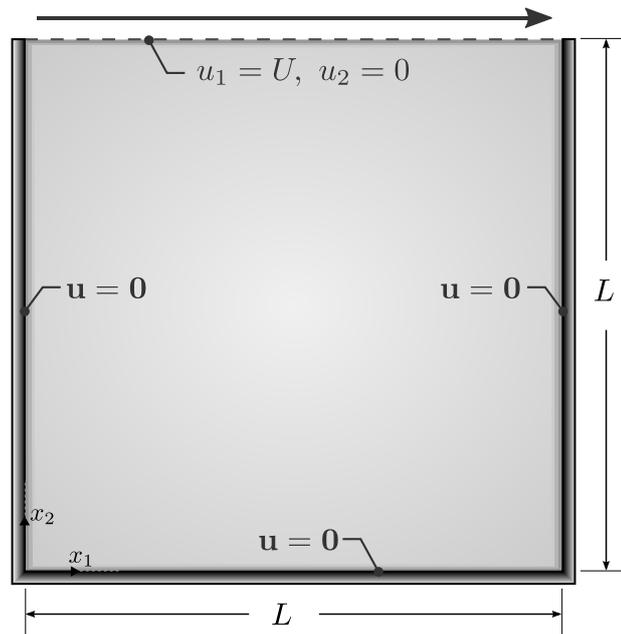


Figura 7.1 – Cavidade e suas condições de contorno

Vale notar que o caso $\operatorname{Re} = 0$ representa um tipo de fluido onde as forças inerciais advectivas são pequenas comparadas as forças viscosas, i.e., um escoamento lento (no inglês, *creeping flow*).

Nas Figuras 7.2, 7.3, 7.4 são apresentados, as isobáricas e linhas de correntes do campo de velocidade obtidas pela formulação GLS do problema (7.1), para $\operatorname{Re} = 0$,

$Re = 400$ e $Re = 1000$, respectivamente. Nota-se que tanto as isobáricas quanto as linhas de corrente apresentam bastante suavidade na solução, indicando que a formulação GLS estabilizou satisfatoriamente as oscilações espúrias inerentes ao clássico método de Galerkin quando utilizando interpoladores de mesma ordem para os campos de velocidade e pressão.

Para o cálculo das linhas de corrente, $\psi(\mathbf{x})$, declara-se o seguinte problema: Dado um campo de velocidade, $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$, encontre um campo escalar, $\psi(\mathbf{x})$, tal que,

$$-\operatorname{div}(\nabla\psi) = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2}, \quad \text{em } \Omega, \quad (7.2)$$

$$-\nabla\psi \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}, \quad \text{em } \Gamma, \quad (7.3)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário e \mathbf{t} é o vetor tangente unitário. Para calcular numericamente a solução das Eqs. (7.2)-(7.3) utiliza-se o Método de Elementos Finitos seguindo a descrição de Frey et al., 2000.

Comparando as soluções das linhas de corrente nas Figuras. 7.2(b), 7.3(b) e 7.4(b) observa-se que, à medida que o número de Reynolds aumenta, a recirculação principal se afasta do bordo superior, ficando cada vez mais próxima do centro da cavidade. Isso ocorre porque em situações com inércia Figura 7.3(b) e Figura 7.4(b), a região inferior da cavidade também irá recircular, fazendo, portanto, o vórtice principal centralizar. Nessas figuras, o campo de pressão perde sua simetria inicial obtida na situação sem inércia (Figura 7.2(a)), criando uma depressão associada à recirculação principal do fluido, o qual se desloca também para a região central da cavidade.

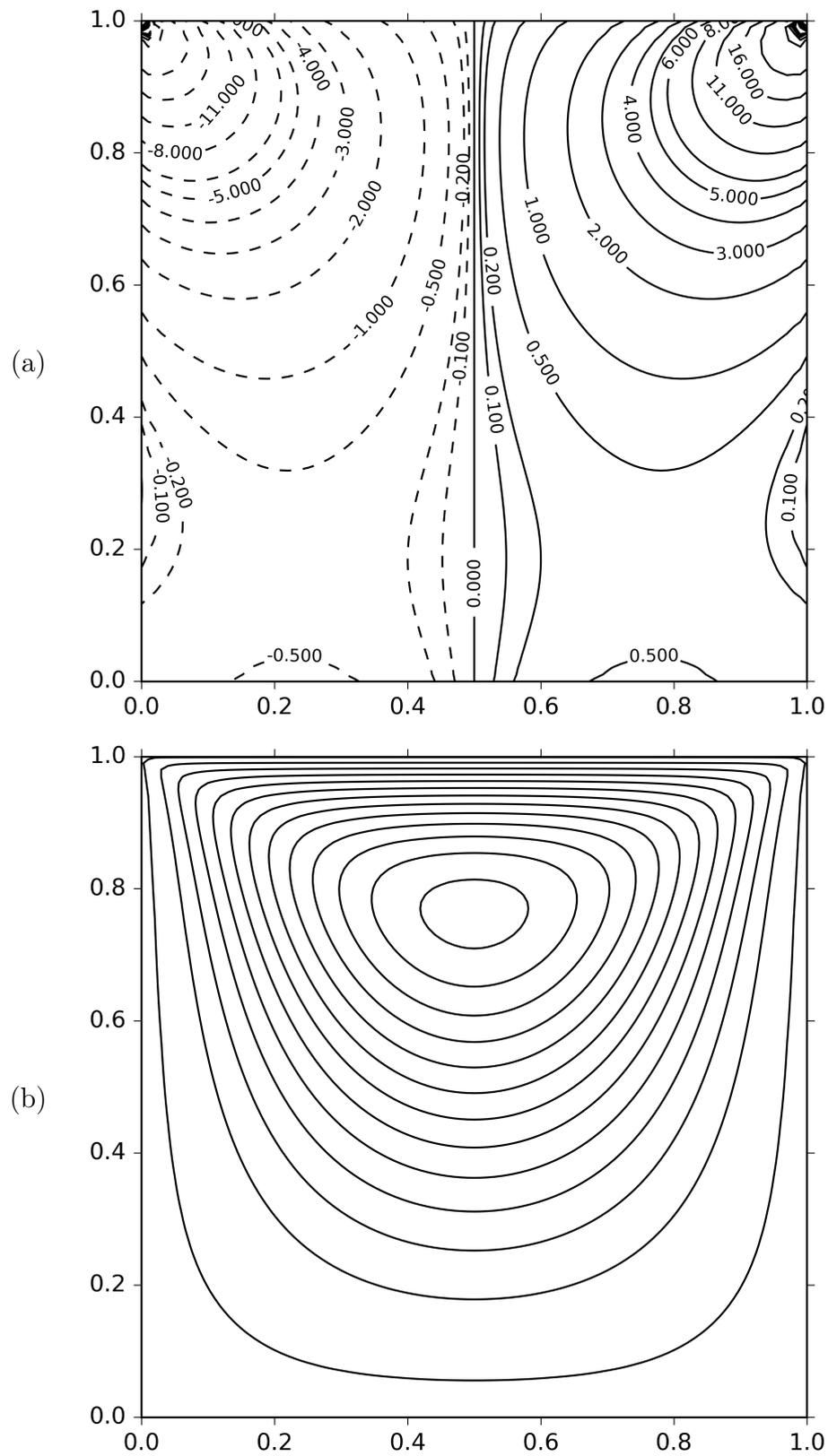


Figura 7.2 – Solução GLS para $Re = 0$, com 10000 elementos Q_1/Q_1 : (a) Isolinhas do campo de pressão, onde as linhas (—) e (- - -) indicam onde a solução é positiva e negativa, respectivamente; (b) Linhas de corrente.

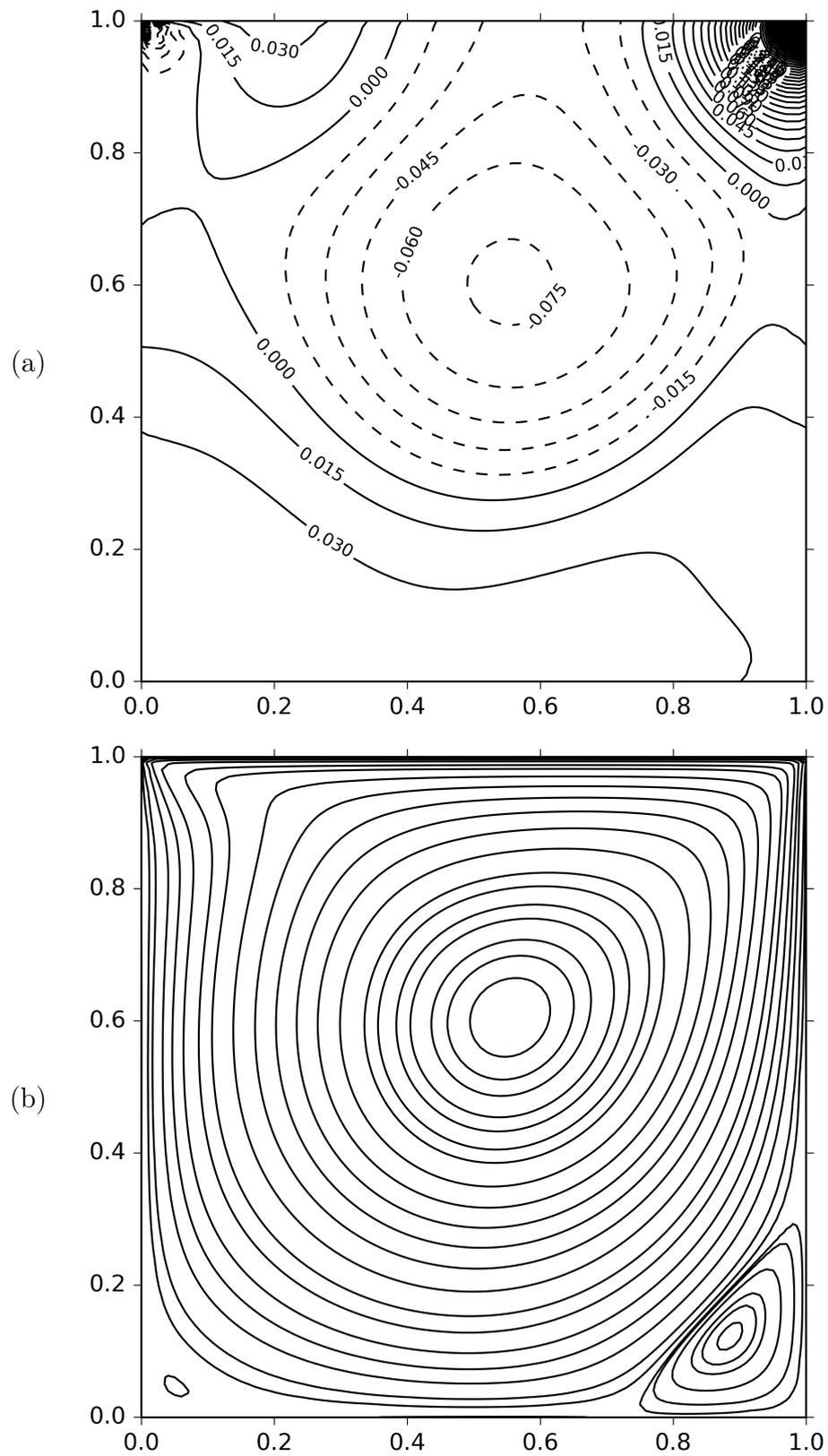


Figura 7.3 – Solução GLS para $Re = 400$, com 10000 elementos Q_1/Q_1 : (a) Isolinhas do campo de pressão, onde as linhas (—) e (- - -) indicam onde a solução é positiva e negativa, respectivamente; (b) Linhas de corrente.

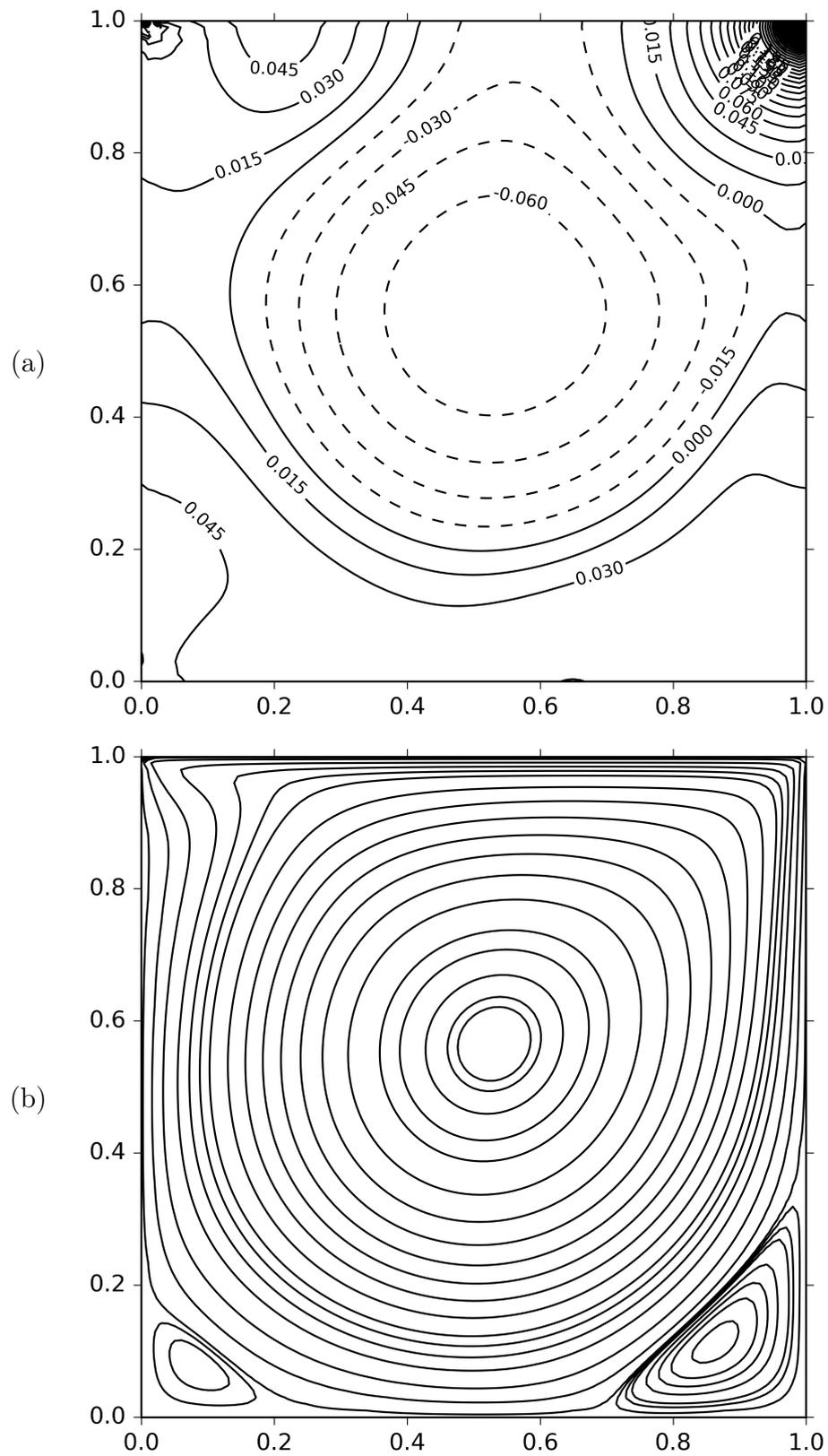


Figura 7.4 – Solução GLS para $Re = 1000$, com 10000 elementos Q_1/Q_1 : (a) Isolinhas do campo de pressão, onde as linhas (—) e (- - -) indicam onde a solução é positiva e negativa, respectivamente; (b) Linhas de corrente.

Nas Figuras. 7.5, 7.6 e 7.7 são comparados os perfis de velocidade com as soluções de Wahba, 2012, — para o caso sem inércia, $Re = 0$ — e Ghia et al., 1982, — para os casos com inércia, .i.e., $Re = 400$ e $Re = 1000$. A partir desses gráficos observa-se que a solução para os perfis de velocidade horizontal, em $x_1 = 0,5$, e os perfis de velocidade vertical, $x_2 = 0,5$, apresentam ótima concordância com as soluções obtidas pelo método GLS, para os valores de Reynolds investigados.

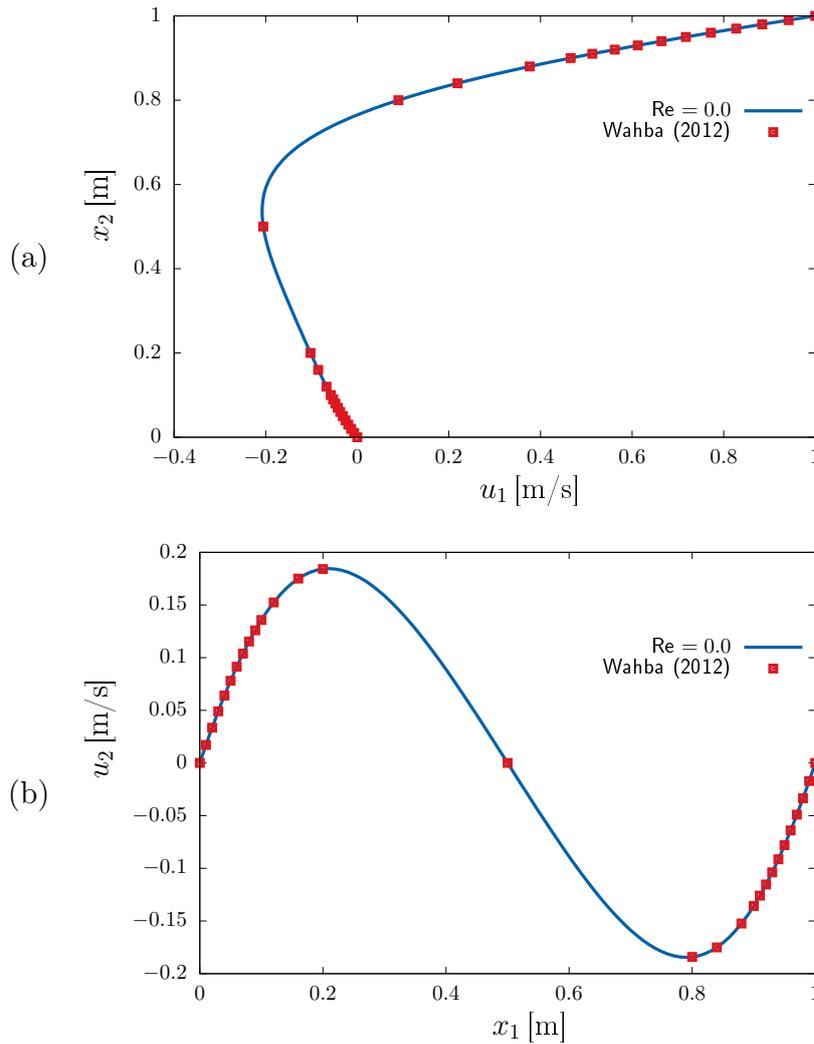


Figura 7.5 – Perfis de velocidade para $Re = 0$: (a) Velocidade horizontal (em $x_1 = 0,5$);
(b) Velocidade vertical (em $x_2 = 0,5$)

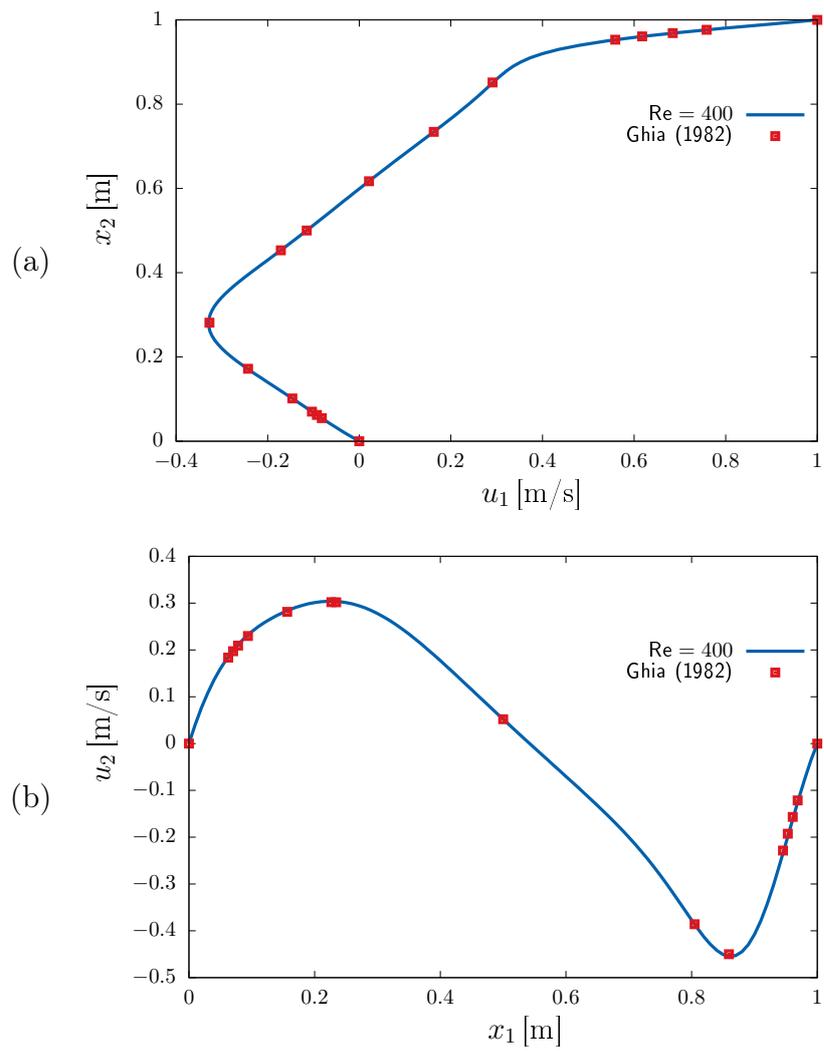


Figura 7.6 – Perfis de velocidade para $Re = 400$: (a) Velocidade horizontal (em $x_1 = 0,5$); (b) Velocidade vertical (em $x_2 = 0,5$)

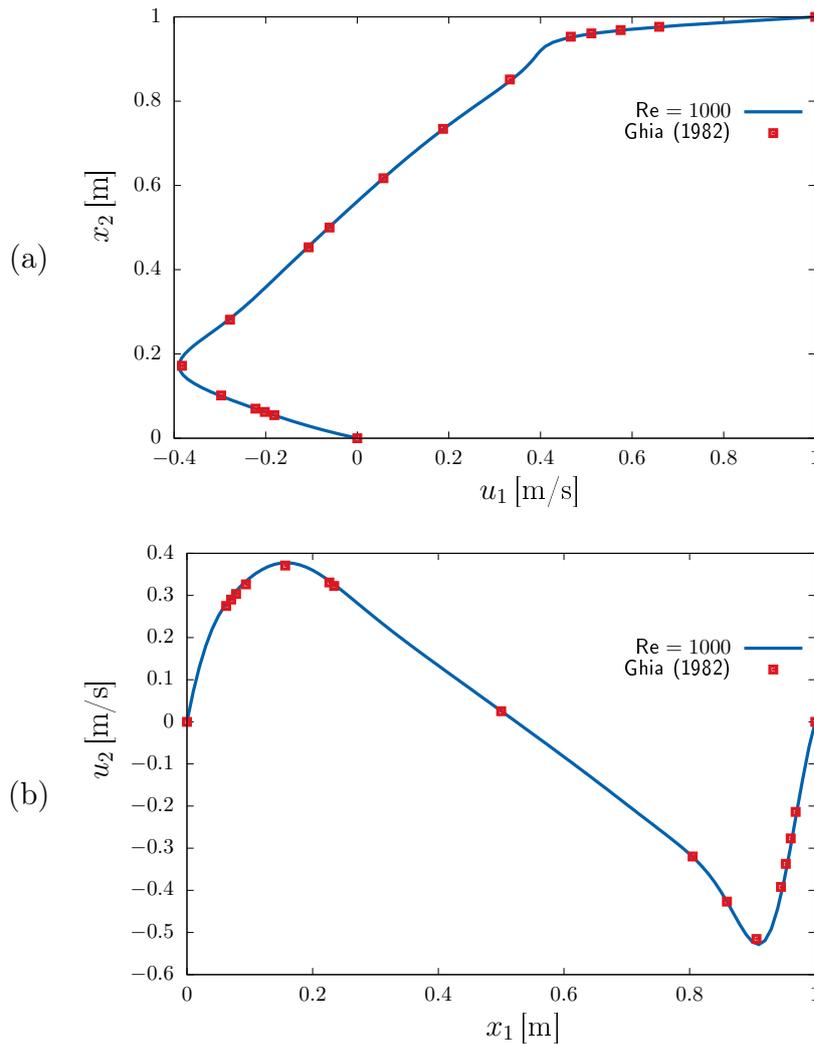


Figura 7.7 – Perfis de velocidade para $Re = 1000$: (a) Velocidade horizontal (em $x_2 = 0, 5$); (b) Velocidade vertical (em $x_1 = 0, 5$)

7.2 Cavidade — Elasto-viscoplástico (EVP)

Nesta seção, a fim de avaliar a formulação proposta neste trabalho, é investigado um escoamento elasto-viscoplástico dentro de uma cavidade quadrada e unitária. A geometria e condições de contorno são as mesmas definidas na Figura 7.1, utilizando um sistema de coordenadas retangulares e comprimento característico $L = 1$. A malha é composta por 10000 elementos (100×100) bilinares ($Q1/Q1/Q1$) e é exibida na Figura 7.8. O topo da cavidade move-se com velocidade horizontal adimensional $U^* = U/(\dot{\gamma}_1 L)$, onde U é a velocidade horizontal no topo da cavidade. O parâmetros reológicos que aparecem nas expressões para a viscosidade e o módulo de elasticidade (Eqs. (5.13) e (5.22)) são

mantidos fixos nos casos analisados, e dados por $m = 2$, $n = 0,5$, $\eta_0^* = 10^3$ e $\eta_\infty^* = 0,01$. Todos os casos mostrados são para um fluido sem tixotropia, i.e., $t_{eq}^* = 0$.

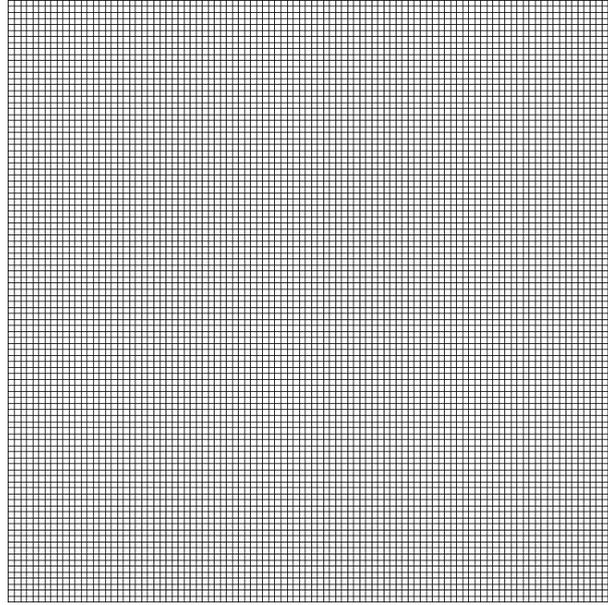


Figura 7.8 – Malha com 10000 elementos ($Q1/Q1/Q1$).

O campo do parâmetro de estrutura é mostrado na Figura 7.9 para $U^* = 0,05$ e $\theta_0^* = 10, 100$ e 1000 . O parâmetro de estrutura define as regiões escoadas (yielded) e aparentemente não-escoadas (unyielded). As regiões aparentemente não-escoadas são as regiões onde a taxa de deformação material é negligenciável devido ao alto valor do parâmetro de estrutura ($\lambda > 0,9$). A Figura 7.9 ainda mostra duas regiões aparentemente não-escoadas (em vermelho, $\lambda > 0,9$) dentro da cavidade: a primeira anexada ao fundo da cavidade, onde o material está praticamente estagnado, e outra mais próxima ao topo da cavidade, dentro da zona de recirculação onde o material está sujeito ao movimento de corpo rígido, i.e., um movimento com velocidade não nula, onde a deformação é negligenciável. Pode ser observado ainda que a elasticidade decresce e deforma as regiões estruturadas (aparentemente não-escoadas) quebrando a simetria em relação ao eixo transversal que passa pelo centro da cavidade.

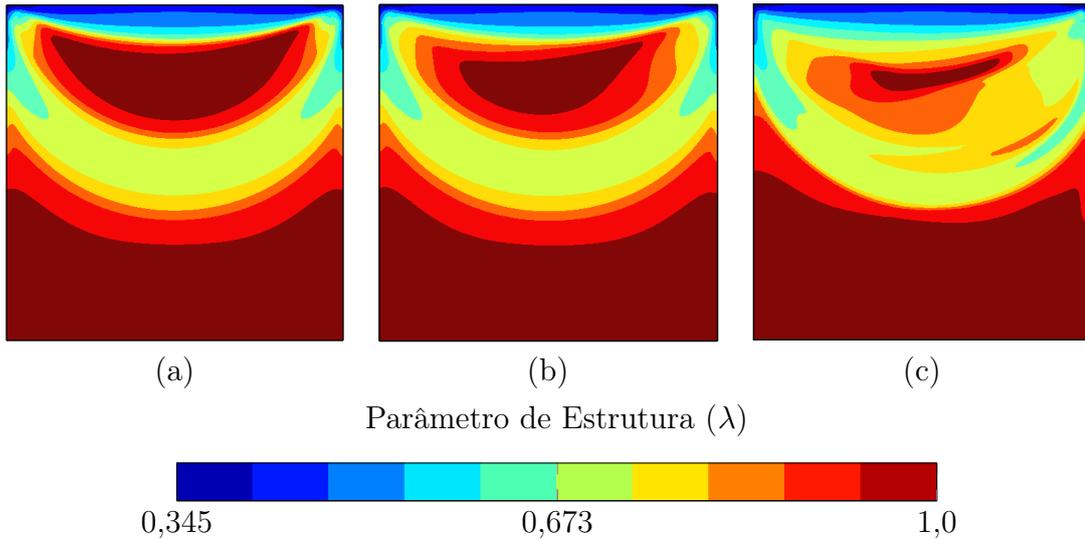


Figura 7.9 – Efeito do tempo de relaxação dentro da cavidade: Regiões de λ para $m = 2$, $U^* = 0,05$, $t_{eq}^* = 0$ e (a) $\theta_0^* = 10$; (b) $\theta_0^* = 100$; (c) $\theta_0^* = 1000$.

Os resultados exibidos nesta seção, para a cavidade unitária, estão de acordo com Frey et al., 2015, — que apresenta um estudo de fluidos elasto-viscoplásticos para diferentes tipos de geometrias — quando comparados qualitativamente. Assim garantindo o uso da formulação utilizada em outros diferentes tipos de problemas.

7.3 Contração Abrupta — EVP com Tixotropia

Nesta seção é apresentada a simulação numérica de um problema elasto-viscoplástico com comportamento tixotrópico, utilizando a formulação descrita pelas Equações (6.1)-(6.4). A geometria e condições de contorno são descritas na Figura 7.10, utilizando um sistema de coordenadas retangulares. A simetria do canal é explorada a fim de economizar o custo de cálculo da solução numérica. De modo que a condição de contorno na linha de simetria é imposta como velocidade vertical nula ($u_2 = 0$) e derivada nula da velocidade horizontal com relação ao eixo vertical ($\partial u_1 / \partial x_2 = 0$). As condições de contorno na entrada do canal para a velocidade horizontal, $u_1 = u_1(x_2)$, e parâmetro de estrutura, $\lambda = \lambda(x_2)$, indicadas na Figura 7.10, correspondem ao escoamento plenamente desenvolvido do qual a velocidade média é denotada por U , tal que $U = \int_0^H u_1(x_2) dx_2$. Enquanto que na saída do canal é considerada tração livre, i.e., $\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{0}$.

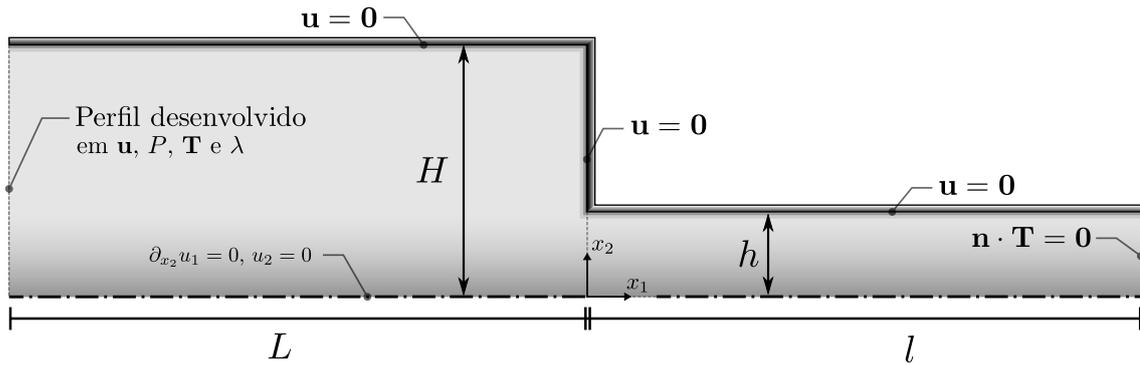


Figura 7.10 – Geometria e condições de contorno da contração abrupta.

Os perfis desenvolvidos $u_1(x_2)$ e $\lambda(x_2)$ são obtidos em processo de continuação envolvendo simulações preliminares, como explicado a seguir. Na primeira simulação preliminar, os perfis retos $u_1 = U$ e $\lambda = 1$ são impostos na entrada. Em seguida, são tomados os perfis de u_1 e λ em algum ponto à jusante na primeira simulação e usados como condição de contorno na entrada da simulação subsequente. Novos perfis a jusante que são mais próximos dos perfis totalmente desenvolvidos são obtidos e usados como condição de contorno na entrada da próxima simulação. O procedimento é repetido até que a convergência seja alcançada. Esse procedimento é repetido de duas a três vezes para que seja obtido perfis totalmente desenvolvidos.

Os parâmetros característicos H e h são definidos de modo que $H/h = 4$ é fixado. O comprimento do canal à montante e à jusante é $50h$. Além disso, será definido que o caso base (ou fluido base) atende os parâmetros $\eta_0^* = 1000$, $\eta_\infty^* = 0,01$, $\theta_0^* = 100$, $U^* = 0,25$, $t_{eq}^* = 1$, $n = 0,5$ e $m = 10$. Desse modo, os resultados obtidos a seguir e nas seções subsequentes, para a influência da cinemática, da elasticidade e tixotropia são obtidos com esses parâmetros ou a partir da variação deles.

O domínio computacional é composto por 10000 elementos bilineares ($Q_1 \times Q_1 \times Q_1 \times Q_1$) e descrito na Figura 7.11.

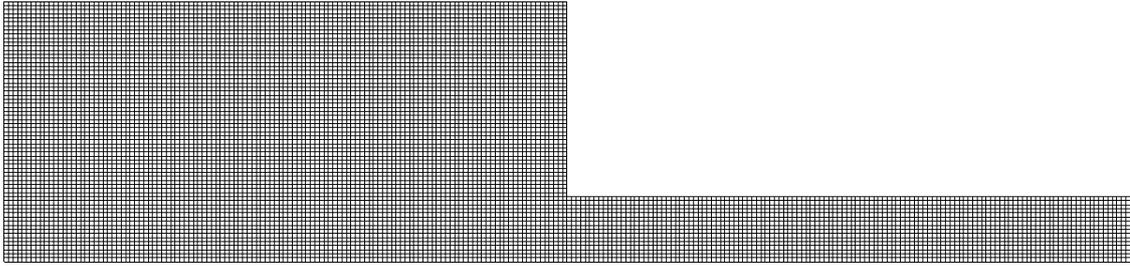


Figura 7.11 – Malha com 10000 elementos bilineares

Para o estudo da qualidade de malha, foram testadas quatro malhas com incrementos mínimos variando de $h_{\min} = 0.1$ a $h_{\min} = 0.05$. A análise consiste na observação do perfil transversal do parâmetro de estrutura, no canal maior da contração, em $x_2^* = -2.0$.

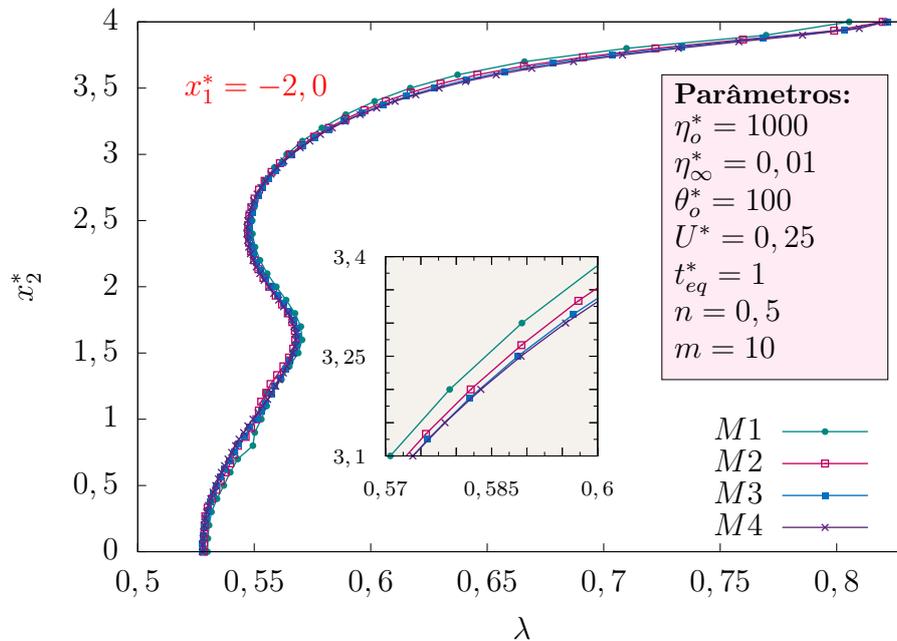


Figura 7.12 – Qualidade de Malha

Na Figura 7.12 é possível observar que os perfis começam a coincidir a partir da malha M3, podendo ser ainda mais notável na caixa com intervalo ampliado entre $x_2^* = 3,1$ e $x_2^* = 3,4$, mostrada na figura. Desse modo, a malha M3 é escolhida como domínio computacional discreto para determinar as soluções do escoamento tixotrópico na contração abrupta.

O número de elementos de cada malha, assim como o valor máximo da componente horizontal da velocidade e seu erro relativo são exibidos na Tabela 7.1. É possível

notar que M3 e M4 atingem a mesma velocidade máxima horizontal, não havendo, assim, necessidade de maior refinamento de malha.

Tabela 7.1 – Convergência de malha

Malha	M1	M2	M3	M4
nós	5241	7761	10315	15381
elementos	5000	7500	10000	15000
max u_1^*	1,16	1,16	1,17	1,17
erro (%)	-	0,64	0,21	0,25

Como dito anteriormente, os perfis desenvolvidos são atingidos por um processo de continuação. É possível notar isso pelo perfil longitudinal do parâmetro de estrutura na linha de simetria da contração, em $x_2^* = 0$. Como mostrado na Figura 7.13, o parâmetro de estrutura parte de um patamar onde o fluido está totalmente estruturado ($\lambda = 1$), atingido após várias reentradas das condições de contorno em $x_1^* = -50$. Quando o fluido se aproxima do plano de contração ($x_1^* = 0$), o parâmetro de estrutura decai abruptamente, indicando que sua microestrutura está se quebrando para o fluido escoar do canal maior para o canal menor. Após a quebra da microestrutura do fluido, na passagem da contração, o parâmetro de estrutura inicia a retomada de um novo perfil.

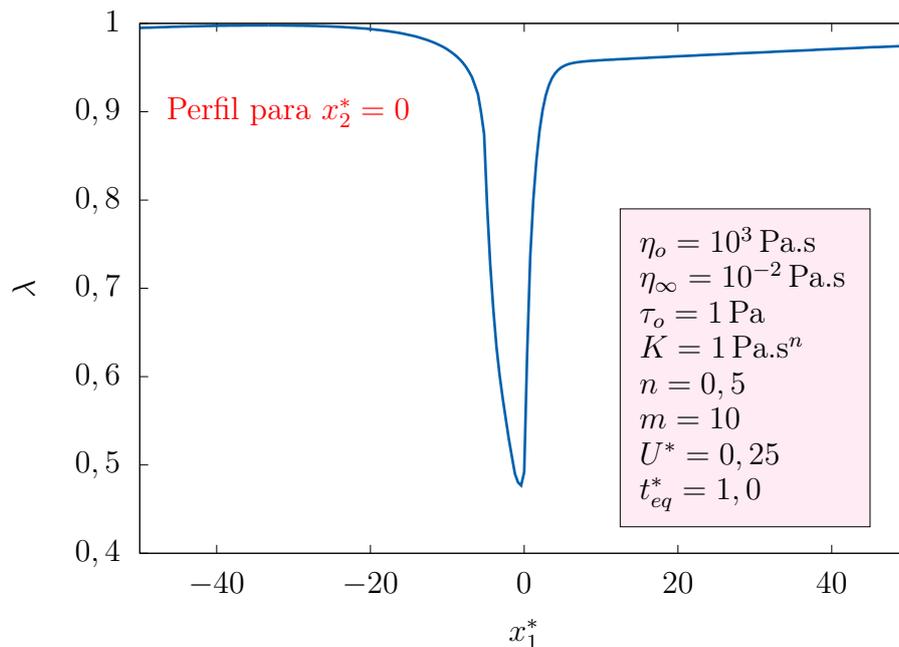


Figura 7.13 – Perfil de λ longitudinal em $x_2^* = 0$

Para que a influência da contração abrupta possa ser melhor observada no escoamento do fluido, o primeiro quarto do domínio será desprezado nos gráficos que apresentam o domínio da contração. Isso pode ser feito sem perda do entendimento físico do problema, visto que a perfil inicia e se mantém desenvolvido até metade do canal maior, antes de sofrer os efeitos da geometria, i.e., da contração abrupta. Seguindo essa concepção, as linhas de corrente são mostradas na Figura 7.14. Essas linhas são tangentes em todos os pontos à velocidade do fluido e indicam também a trajetória de uma partícula no fluido, pois o escoamento está em regime permanente. Caso o escoamento não estivesse em regime permanente, a cada instante uma partícula no fluido poderia seguir uma linha de corrente diferente.

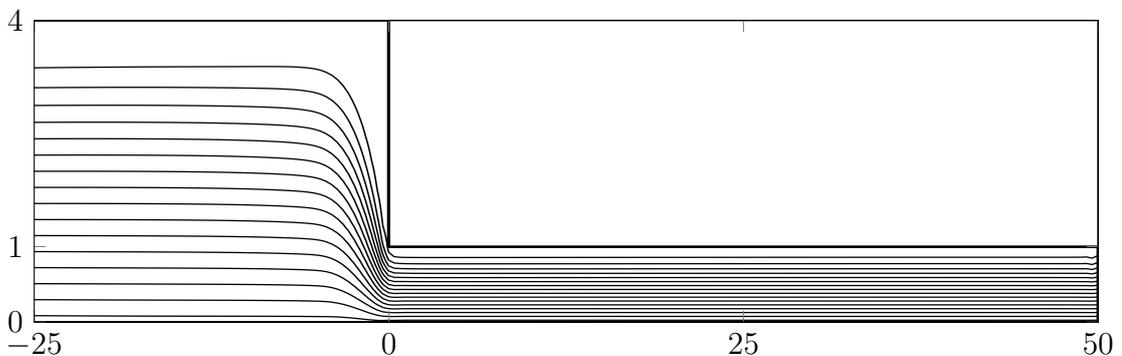


Figura 7.14 – Linhas de Corrente para o caso base.

Para os escoamentos simulados, a queda de pressão do canal de entrada (maior) para o canal de saída (menor) fica evidente pelo gráfico da Figura 7.15. A fim de que a vazão seja mantida, a velocidade no canal menor aumenta e, conseqüentemente, a pressão diminui abruptamente. Esse comportamento já é esperado e conhecido pelo princípio de Bernoulli, visto que velocidade e pressão são inversamente proporcionais. O perfil longitudinal mostrado foi obtido na linha de simetria, em $x_2^* = 0$, para o caso base.

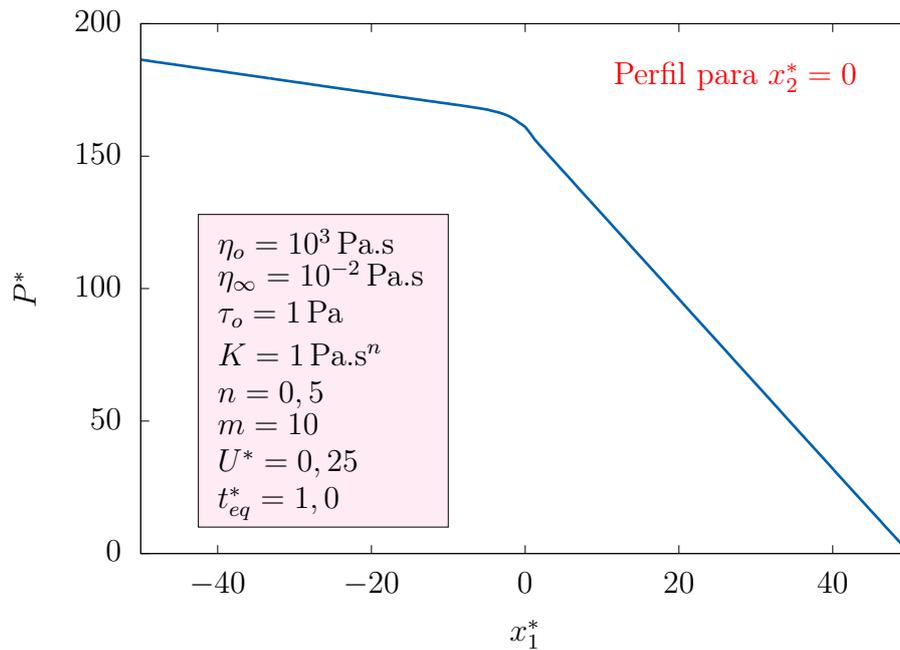


Figura 7.15 – Queda da Pressão

Nas seções a seguir, será feita análise do escoamento tixotrópico a partir da variação dos parâmetros do caso base. Desse modo, os efeitos da cinemática, da elasticidade e tixotropia são melhor compreendidos nos escoamentos. Serão apresentados os gráficos com as isobandas do parâmetro de estrutura (λ), as regiões aparentemente não-escoadas (regiões pretas) e a deformação elástica (γ_e).

É importante notar que somente as regiões aparentemente não-escoadas apresentam elasticidade; afora delas o material escoava como um fluido puramente viscoso — linearmente ou não dependendo da intensidade da taxa de deformação. A distribuição da magnitude da deformação elástica no interior das regiões aparentemente não-escoadas é dada pela razão entre a magnitude do tensor extra de tensão τ , definido na Eq. (4.56), e o módulo de elasticidade ao cisalhamento G , definido em (4.50), i.e.,

$$\gamma_e = \frac{\tau}{G} = \frac{\left(\frac{1}{2}\text{tr } \boldsymbol{\tau}^2\right)^{1/2}}{G(\lambda)} \quad (7.4)$$

7.3.1 Efeito da Cinemática

Nesta seção, a influência da cinemática em um escoamento tixotrópico é analisada. Pela Figura 7.16 é possível notar que o aumento da intensidade do escoamento na condição de entrada causa uma redução no nível de estruturação do material, visto pela diminuição

contração, as regiões que parecem estar coladas na parede do canal maior são reduzidas pelo efeito causado com o aumento da vazão.

No canal menor da contração, além de serem reduzidas, as zonas pretas são deslocadas à jusante devido aos efeitos cinemáticos e de conservação da massa, i.e., devido ao aumento da intensidade do escoamento ao passar do canal maior para o menor, para conservar a vazão, a medida que a intensidade na entrada também é aumentada.

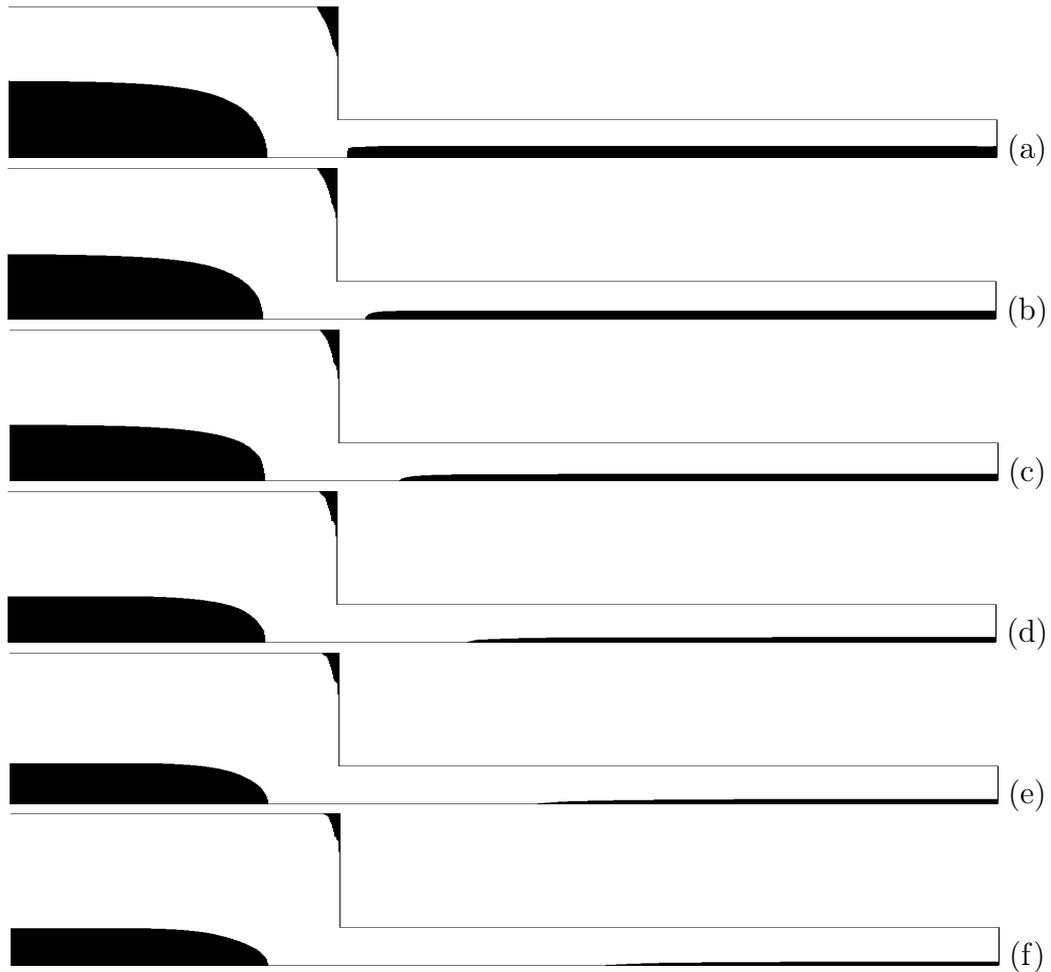


Figura 7.17 – Efeito da cinemática nas regiões aparentemente não-escoadas para $\theta_o^* = 100$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $U^* = 0,1$; (b) $U^* = 0,25$; (c) $U^* = 0,5$; (d) $U^* = 1$; (e) $U^* = 1,5$ e (f) $U^* = 2$.

Nos resultados para a deformação elástica mostrados na Figura 7.19, nota-se também a diminuição das regiões com maior deformação elástica, assim como um aumento na sua magnitude a medida que a intensidade do escoamento é aumentada. Na verdade, como foi dito anteriormente, os efeitos de elasticidade são ocorrem nas zonas pretas, e como essas regiões diminuem devido ao aumento da vazão — como mostrado na Figura

7.17 —, as regiões com deformação elástica também diminuem.

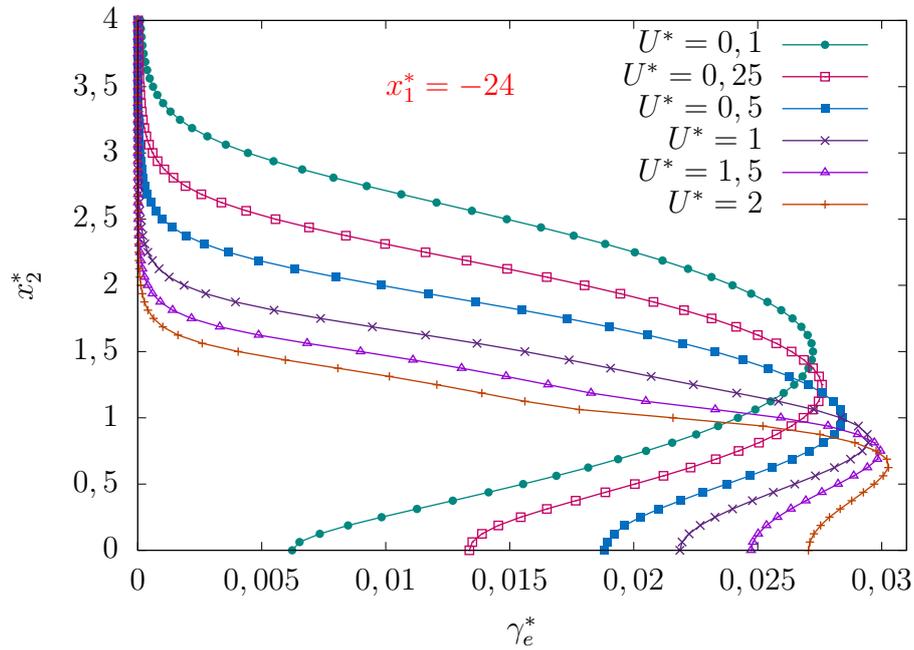


Figura 7.18 – Perfis transversais de deformação elástica, em $x_1^* = -24$, para $\theta_o^* = 100$ e $t_{eq}^* = 1$ obtidos pela variação de U^*

De fato, os perfis transversais, na Figura 7.18, apontam que o material possui seu nível máximo de elasticidade nas regiões aparentemente não-escoadas, fora delas a deformação elástica é nula. Os perfis confirmam a posição das regiões pretas no canal maior e mostram que a deformação elástica aumenta próxima a linha de centro.

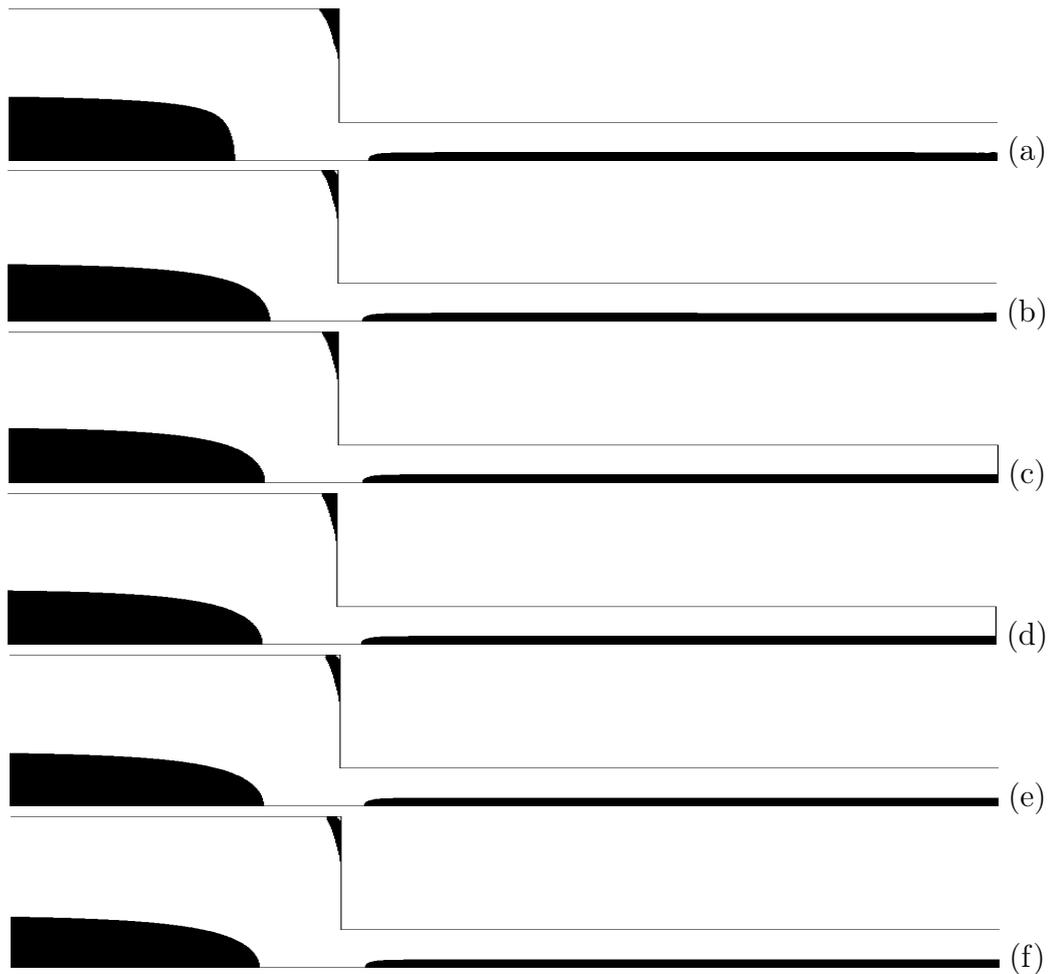


Figura 7.21 – Efeito da elasticidade nas regiões aparentemente não-escoadas para $U^* = 0,25$ e $t_{eq}^* = 1$: (a) $\theta_o^* = 0,1$; (b) $\theta_o^* = 1000$; (c) $\theta_o^* = 1111$; (d) $\theta_o^* = 1250$; (e) $\theta_o^* = 1429$; (f) $\theta_o^* = 1667$.

A morfologia das regiões aparentemente não-escoadas praticamente não é afetada com a variação do tempo de relaxação, visto que a intensidade do escoamento, U^* , e o tempo de equilíbrio, t_{eq} , são mantidos constantes. No canal maior, nota-se uma sutil variação longitudinal das zonas pretas com o aumento do tempo de relaxação, principalmente de $\theta_o^* = 0,1$ — onde os efeitos elásticos são praticamente desprezíveis devido ao baixo valor do tempo de relaxação — para $\theta_o^* = 1000$. Já no canal menor qualquer alteração é imperceptível.

Como esperado, a deformação elástica é adicionada somente nas regiões aparentemente não-escoadas, conforme exibido na Figura 7.22. Além disso, o fluido apresenta maiores valores para deformação elástica junto a linha de simetria. Maiores valores para a deformação elástica junto a linha de simetria significa que o material se torna mais flexível

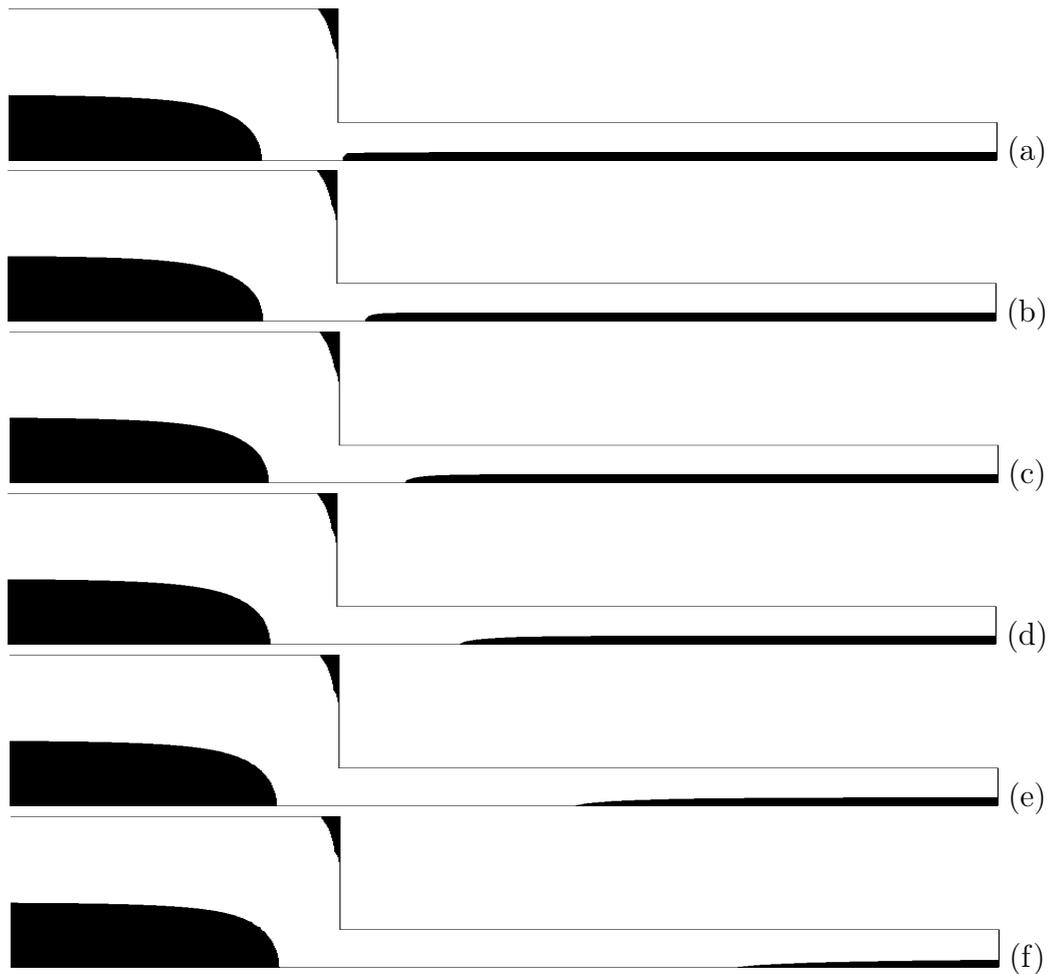


Figura 7.24 – Efeito da tixotropia nas regiões aparentemente não-escoadas para $U^* = 0,25$ e $\theta_o^* = 100$: (a) $t_{eq}^* = 0,1$; (b) $t_{eq}^* = 1$; (c) $t_{eq}^* = 2,5$; (d) $t_{eq}^* = 5$; (e) $t_{eq}^* = 10$ e (f) $t_{eq}^* = 17$.

O aumento do tempo de equilíbrio provoca uma reestruturação mais lenta da microestrutura do material, após a alteração de tensão na vizinhança da contração. Logo, as partículas materiais, ao entrem no canal menor, permanecem mais tempo no seu estado escoado devido a resposta lenta ao aumento da tensão.

Essa resposta lenta torna-se progressivamente maior à medida que o tempo de equilíbrio é aumentado. Por isso, na Figura 7.24 as zonas pretas são formadas cada vez mais próximas a saída do canal menor.

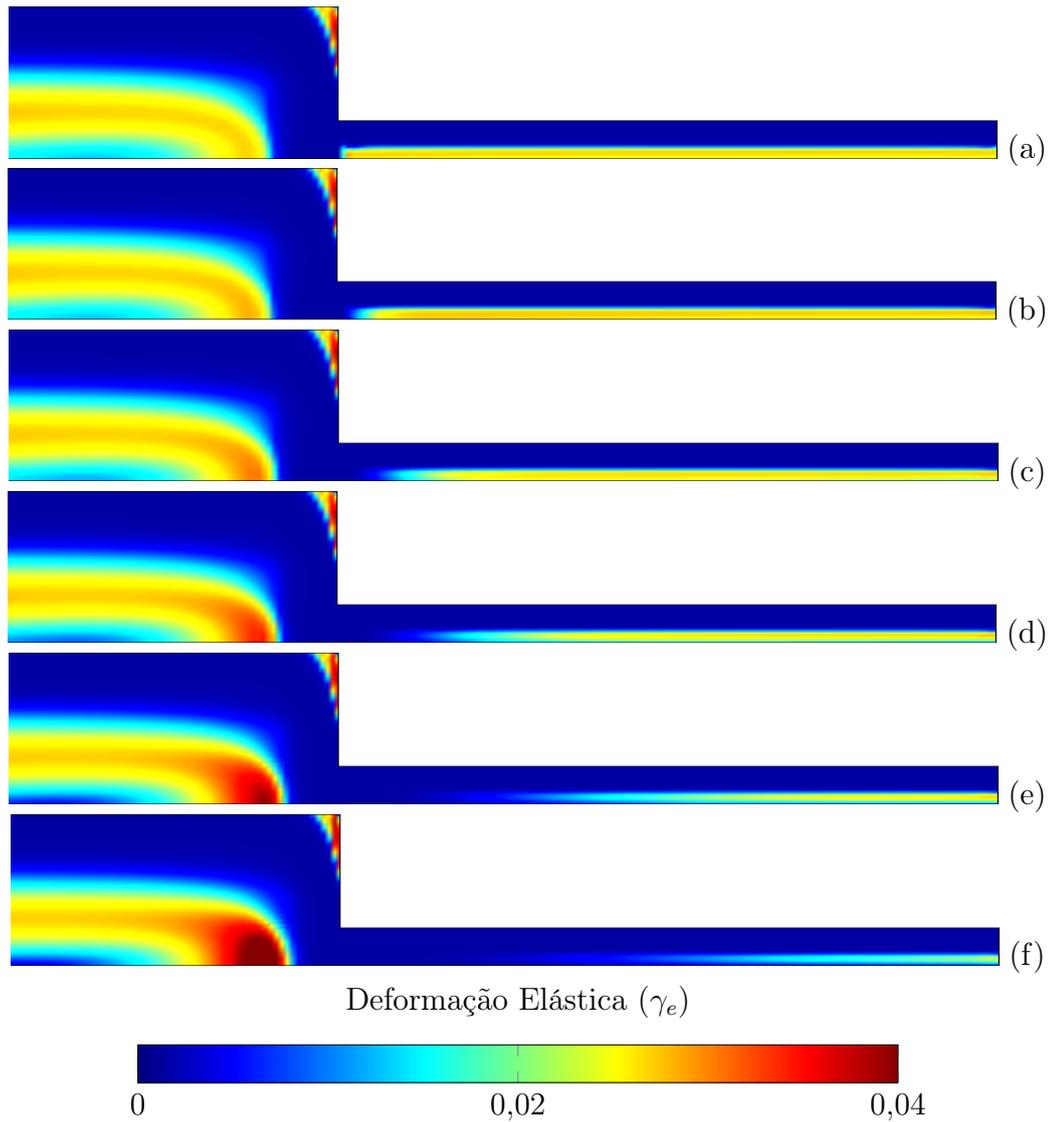


Figura 7.25 – Deformação elástica para $U^* = 0,25$ e $\theta_o^* = 100$: (a) $t_{eq}^* = 0,1$; (b) $t_{eq}^* = 1$; (c) $t_{eq}^* = 2,5$; (d) $t_{eq}^* = 5$; (e) $t_{eq}^* = 10$ e (f) $t_{eq}^* = 17$.

Como nos outros caso já citados, a deformação elástica surge apenas nas regiões aparentemente não-escoadas. Ademais, no canal maior, os efeitos da deformação elástica são intensificados antes do plano da contração, como mostrado na Figura 7.25. Nesse caso, o aumento da tixotropia carrega as regiões com maior elasticidade para cada vez mais próximas da entrada do canal menor, onde a tensão de cisalhamento é mais acentuada.

Por outro lado, observa-se que mantendo o tempo de relaxação fixo, bem como a intensidade da vazão, a deformação elástica diminui significativamente no canal menor da contração à medida que t_{eq}^* aumenta. Além disso, a região logo após o plano de contração, onde não há deformação elástica, aumenta com o aumento do tempo de equilíbrio (t_{eq}^*).

8 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Nesta tese foi apresentado a investigação numérica de um escoamento sem inércia de um fluido elasto-viscoplástico tixotrópico em uma contração planar abrupta. A formulação foi baseada no modelo constitutivo de [De Souza Mendes, 2011] para fluidos estruturados que é composta por duas equações, uma para a tensão e outra para o parâmetro de estrutura — uma quantidade escalar que representa o nível de estruturação do fluido. A equação para a tensão é obtida baseando-se em uma representação analógica de um elemento de Maxwell em paralelo com um elemento newtoniano, resultando em uma equação que possui a mesma forma das equações de Oldroyd-B. O tempo de relaxação e retardamento que surgem são funções do parâmetro de estrutura. As ideias propostas por [De Souza Mendes, 2009] foram usadas para a equação de evolução do parâmetro de estrutura, assim como a formulação da viscosidade e do módulo de elasticidade em função do parâmetro de estrutura. Além das duas equações do modelo constitutivo, estão associadas ao modelo a equação da quantidade de movimento e a equação da conservação de massa, onde, nessa última, a condição de incompressibilidade é imposta ao fluido.

Foi proposto ainda um modelo inédito de função de viscosidade para fluidos viscoplásticos, denominada função viscoplástica harmônica (VPH). Essa função é contínua e apresenta um platô para as altas viscosidades, seguida de uma rápida queda a partir da tensão limite de escoamento, e uma subsequente região power-law. As comparações com outras funções viscosidades, mais frequentes na literatura, mostram que essa nova função faz um ajuste de curva tão bom quanto as já disponíveis, com a vantagem de exibir um platô tanto para as altas, quanto as baixas viscosidades, além de não depender de um termo exponencial como modelo de Papanastasiou. A VPH é utilizada na obtenção de todos os resultados que envolvem a contração abrupta e mostrou-se de fácil implementação nas simulações computacionais.

Com relação aos parâmetros adimensionais, os procedimentos usuais de adimensionalização podem gerar famosos grupos adimensionais como número de Reynolds, Deborah ou Weissenberg, número de Carreau, número de Bingham, entre outros. Os grupos adimensionais que representam propriedades reológicas (e.g. número de Weissenberg, de Carreau e de Bingham) envolvem quantidades como velocidade característica ou taxas de deformação, conseqüentemente, para um material fixo escoando, os valores desses grupos

variam com a vazão. Com procedimento alternativo, proposto por [De Souza Mendes, 2007] e utilizado neste trabalho, os grupos adimensionais reológicos resultantes são na verdade propriedades reológicas adimensionais, e assim mantêm-se fixas para um dado material escoando. Os grupos adimensionais que governam o problema adimensional resultante são menos acoplados entre si, em comparação com os grupos adimensionais tradicionais, no sentido que alguns envolvem apenas propriedades reológicas e outros propriedades apenas fluidas e parâmetros geométricos. Por exemplo, o efeito da inércia pode ser mais facilmente investigado experimentalmente alterando o número reológico de Reynolds através de mudanças do comprimento característico, enquanto o número de Deborah reológico, que está relacionado ao $\theta^* = \theta\dot{\gamma}_1$, é mantido fixo [De Souza Mendes, 2007].

A discretização das equações que modelam o problema foi feita pelo Método de Elementos Finitos (MEF). A ideia do MEF parte da obtenção da formulação variacional — ou formulação fraca — do problema contínuo, através da multiplicação por funções teste. A partir da formulação variacional, o problema discreto é proposto adotando funções teste polinomiais, o que caracteriza o método de elementos finitos. As funções polinomiais escolhidas para a discretização das variáveis primais são todas de primeiro grau. Apesar do ganho computacional, essa escolha viola a condição LBB e provoca modos espúrios na solução. Para contornar esse problema, o método de Galerkin Mínimos Quadrados é adotado como forma de estabilizar o problema adicionando termos na formulação discreta que não alteram a consistência do modelo.

A modelagem mecânica e numérica apresentada foi utilizada na simulação de um fluido elasto-viscoplástico com comportamento tixotrópico em uma contração abrupta, com razão de aspecto 4 : 1. Para isso, um estudo de qualidade de malha foi apresentado, observando o perfil transversal do parâmetro de estrutura. A malha com 10000 elementos quadrangulares foi escolhida. Além disso, em todas as simulações apenas metade do domínio foi discretizada, a fim de explorar a simetria da contração abrupta.

Através de um processo de continuação, os perfis desenvolvidos foram obtidos para as variáveis primais, o que permite exibir os resultados apenas na parte onde há atuação da contração. O estudo do fluido tixotrópico na contração é realizado observando a influência da cinemática, da elasticidade e da tixotropia do material variando parâmetros, a partir de um caso base, que agem diretamente em cada um desses aspectos.

Os efeitos cinemáticos foram analisados variando a vazão de entrada, através do au-

mento da velocidade média (U^*) do escoamento. Os resultados mostraram que o aumento da velocidade média do escoamento gera no fluido uma diminuição das zonas aparentemente não-escoadas. Isso porque o aumento da vazão causa maiores quebras na microestrutura do fluido. É totalmente compreensível e esperado que esse comportamento ocorra, pois quanto maior a velocidade, maior será a taxa de cisalhamento.

A análise dos efeitos da elasticidade foi feita pela variação do tempo de relaxação (θ_0^*). Foi visto que, apesar do aumento do tempo de relaxação, a morfologia do material é praticamente inalterada. Além disso, notou-se que os efeitos de elasticidade são adicionados apenas nas regiões pretas, como foi mostrado nos gráficos da deformação elástica.

Finalmente, a influência da tixotropia no material elasto-viscoplástico é analisada variando o tempo de equilíbrio (t_{eq}^*). Como mostrado, as regiões aparentemente não-escoadas são reduzidas, com o aumento do tempo de equilíbrio, principalmente no canal menor da contração. Esse efeito também é resultado do aumento do tempo de equilíbrio, no qual o material leva um tempo maior de resposta para reconstruir sua microestrutura, após a alteração de tensão sofrida ao passar pela contração.

8.1 Comentários

A formulação multi-campos de elementos finitos baseado no método de Galerkin Mínimos Quadrados (GLS) mostrou-se estável, mesmo utilizando elementos quadrangulares bilineares de ordem inferior, na aproximação de escoamento de fluidos newtoniano, elasto-viscoplástico com ou sem tixotropia.

Apesar de não focar no estudo de tempo computacional da função VPH, nas simulações que foram possíveis calcular esse tempo, a função VPH apresentou menor tempo de simulação quando comparada às funções viscosidades como SMD e Papanastasiou, por exemplo. Isso certamente é uma vantagem do seu equacionamento, que não exhibe o termo exponencial presente nas outras duas funções. Apesar disso, dependendo do chute inicial e dos parâmetros passados ao fluido, a simulação de cada caso consumiu aproximadamente entre 4 horas até 72 horas de simulação.

Algumas instabilidades numéricas podem ser notadas, principalmente no canto superior direito, do canal maior da contração abrupta. Para esse caso, cabe um estudo mais detalhado para detectar se somente um refinamento local de malha é suficiente para

remover os ruídos que aparecem ocasionalmente, ou ainda se é necessário usar um outro método numérico para resolver o sistema não-linear de equações. Apesar disso, todos os resultados são fisicamente realista e conseguem prever o comportamento de fluido elasto-viscoplástico com comportamento tixotrópico.

8.2 Perspectivas Futuras

Para melhores conclusões sobre as vantagens computacionais de utilizar a função VPH, espera-se comparar essa função com outras já disponíveis na literatura para identificar se esse ganho é significativo na simulação de fluidos tixotrópicos. A redução do tempo computacional é um importante aspecto a ser analisado, visto que a simulação desse tipo de material consome um número significativo de horas, dependendo do chute inicial e dos parâmetros passados ao fluido.

Uma outra proposta, mais a longo prazo, é paralelizar todo o código computacional como forma reduzir o tempo de CPU. Esse estudo já está em estágio inicial e sem dúvida é um anseio do grupo de pesquisa para otimizar a busca mais rápida e otimizada de resultados.

Além da melhora no tempo computacional, espera-se introduzir os efeitos de inércia nesses tipos de fluidos. No entanto, estudos como o desta tese são necessários para verificar se o código computacional tem a capacidade de representar o que é fisicamente esperado para esse tipo de fluido. Somente então, estudos mais robusto e que demandam um grande esforço computacional como esse podem ser executados com alguma confiabilidade.

Outro interesse futuro é implementação da técnica de conformação logarítmica da tensão no código de elementos finitos NNFEM, possibilitando resultados com maiores níveis de elasticidade para escoamento de fluidos viscoelásticos como os modelos de Maxwell e Oldroyd-B.

Além disso, outros interesses secundários é a resolução de problema de fronteira livre como forma de estudar o revestimento de superfícies; a implementação de malhas adaptativas visando melhor captura entre zonas aparentemente não-escoadas e escoadas; e a extensão do método de Galerkin Mínimos Quadrados para a resolução de problemas tridimensionais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aris, R. **Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics**. Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 1990.

Astarita, G. and Marrucci, G. **Principles of non-Newtonian fluid mechanics**. McGraw-Hill, 1974.

Babuška, I. Error-bounds for finite element method, **Numerische Mathematik**, vol. 16(4), p. 322–333, 1971.

Barnes, H. A. Thixotropy—a review, **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, vol. 70(1), p. 1 – 33, 1997.

Barnes, H. A. The yield stress – a review or "παντα ρει" – everything flows?, **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, vol. 81, p. 133–178, 1999.

Behr, M. A., Franca, L. P., and Tezduyar, T. E. Stabilized finite element methods for the velocity-pressure-stress formulation of incompressible flows, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 104(1), p. 31–48, 1993.

Bingham, E. C. **Fluidity and Plasticity**. McGraw-Hill, New York, 1922.

Bird, R. B. The Rheology and Flow of Viscoplastic Materials, **Reviews in Chemical Engineering**, vol. 1, p. 1–70, 1982.

Bodnár, T. and Sequeira, A., **Numerical Study of the Significance of the Non-Newtonian Nature of Blood in Steady Flow Through a Stenosed Vessel**, pages 83–104. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010.

Brebbia, C. A. **Viscous Flow Applications**. Topics in Boundary Element Research. Springer Berlin Heidelberg, 2013.

Brezzi, F. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers, **ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique**, vol. 8(R2), p. 129–151, 1974.

Carreau, P. J. Rheological Equations from Molecular Network Theories, **Transactions of The Society of Rheology**, vol. 16(1), p. 99–127, 1972.

Coussot, P., Nguyen, Q. D., Huynh, H. T., and Bonn, D. Avalanche Behavior in Yield Stress Fluids, **Phys. Rev. Lett.**, vol. 88, p. 175501, 2002.

De Souza Mendes, P. R. Dimensionless non-Newtonian fluid mechanics, **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, vol. 147(1), p. 109–116, 2007.

De Souza Mendes, P. R. Modeling the thixotropic behavior of structured fluids, **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, vol. 164(1–3), p. 66 – 75, 2009.

De Souza Mendes, P. R. Thixotropic elasto-viscoplastic model for structured fluids, **Soft Matter**, vol. 7, p. 2471–2483, 2011.

De Souza Mendes, P. R. and Dutra, E. S. S. Viscosity function for yield-stress liquids, **Appl. Rheol**, vol. 14(6), p. 296–302, 2004.

Fan, Y., Tanner, R., and Phan-Thien, N. Galerkin/least-square finite-element methods for steady viscoelastic flows, **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, vol. 84(2), p. 233–256, 1999.

Franca, L. P. and Frey, S. L. Stabilized finite element methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 99(2–3), p. 209 – 233, 1992.

Franca, L. P. and Hughes, T. J. Two classes of mixed finite element methods, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 69(1), p. 89 – 129, 1988.

Freundlich, H. Ueber Thixotropie, **Kolloid-Zeitschrift**, vol. 46(4), p. 289–299, 1928.

Frey, S., Martins-Costa, M. L., and Araujo, J. H. C. d. An alternative finite element formulation for determination of streamlines in two-dimensional problems, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences**, vol. 22, p. 249 – 258, 2000.

Frey, S. L., Naccache, M. F., de Souza Mendes, P. R., Thompson, R. L., dos Santos, D. D., Link, F. B., and Fonseca, C. Performance of an elasto-viscoplastic model in some benchmark problems, **Mechanics of Time-Dependent Materials**, vol. 19(3), p. 419–438, 2015.

Gamble, D. L. THIXOTROPY IN PAINTS Influence on Packaging and Application Properties of Flat Wall Coatings, **Industrial & Engineering Chemistry**, vol. 28(10), p. 1204–1210, 1936.

Ghia, U., Ghia, K. N., and Shin, C. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method, **Journal of computational physics**, vol. 48(3), p. 387–411, 1982.

Harari, I. and Hughes, T. J. What are C and h?: Inequalities for the analysis and design of finite element methods, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 97(2), p. 157 – 192, 1992.

Huang, C. and Fabisiak, W. Thixotropic parameters of whole human blood, **Thrombosis research**, vol. 8, p. 1–8, 1976.

Huang, C., Siskovic, N., Robertson, R., Fabisiak, W., Smitherberg, E., and Copley, A. Quantitative characterization of thixotropy of whole human blood, **Biorheology**, vol. 12, p. 279–282, 1975.

Hughes, T. J., Franca, L. P., and Balestra, M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. Circumventing the Babuška-Brezzi condition: A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 59(1), p. 85–99, 1986.

IUPAC. **Compendium of Chemical Terminology**, 2nd ed. (the "Gold Book"). versão on-line, 1997.

Johnson, C. **Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method**. Dover Books on Mathematics Series. Cambridge University Press, 1987.

Ladyzhenskaya, O. **The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow**. Gordon and Breach, 1969.

Layton, W. **Introduction to the Numerical Analysis of Incompressible Viscous Flows**. Computational Science and Engineering. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.

Machado, J. **Reologia e escoamento dos fluidos: ênfase na indústria do petróleo**. Interciência, 2002.

McMillen, E. L. Thixotropy and Plasticity. I—The Measurement of Thixotropy, **Journal of Rheology**, vol. 3(1), p. 75–94, 1932.

Mewis, J. and Wagner, N. J. Thixotropy, **Advances in Colloid and Interface Science**, vol. 147–148, p. 214 – 227, 2009.

Mujumdar, A., Beris, A. N., and Metzner, A. B. Transient phenomena in thixotropic systems, **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, vol. 102(2), p. 157 – 178, 2002.

Oden, J. T. **Penalty-finite element methods for constrained problems in elasticity**. In *Proc. of Symposium on Finite Element Method*, 1982.

Oldroyd, J. G. On the Formulation of Rheological Equations of State, **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, vol. 200(1063), p. 523–541, 1950.

Papanastasiou, T. C. Flows of Materials with Yield, **Journal of Rheology**, vol. 31(5), p. 385–404, 1987.

Péterfi, T. Die Abhebung der Befruchtungsmembran bei Seeigeleiern, **Wilhelm Roux' Archiv für Entwicklungsmechanik der Organismen**, vol. 112(1), p. 660–695, 1927.

Rao, A. **Rheology of Fluid and Semisolid Foods: Principles and Applications**. Food Engineering Series. Springer US, 2010.

Reddy, J. and Gartling, D. **The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics, Third Edition**. Computational Mechanics and Applied Analysis. Taylor & Francis, 2010.

Rudin, W. **Real and Complex Analysis**. Tata McGraw-Hill, 1987.

Waele, A. D. Viscometry and plastometry, **Oil & Colour Chemists Association**, vol. 6, p. 33–88, 1923.

Wahba, E. Steady flow simulations inside a driven cavity up to Reynolds number 35,000, **Computers & Fluids**, vol. 66, p. 85 – 97, 2012.

APÊNDICE A – NOMENCLATURAS

A.1 Vetores e Tensores

1. Produto escalar:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_1v_1 + u_2v_2 = u_iv_i \quad (\text{A.1})$$

2. Contração de tensores:

$$\mathbf{T} : \mathbf{S} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 T_{ij}S_{ij} = T_{ij}S_{ij} \quad (\text{A.2})$$

3. Tensor gradiente:

$$\nabla \mathbf{u} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = u_{j,i} \quad (\text{A.3})$$

4. Divergente de um campo vetorial:

$$\text{div } \mathbf{u} = \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = u_{j,j} \quad (\text{A.4})$$

5. Tensor deformação:

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T] = \frac{1}{2}[u_{j,i} + u_{i,j}] \quad (\text{A.5})$$

6. Derivada de Jaumann:

(a) Derivada Convectada Superior:

$$\overset{\nabla}{\mathbf{J}} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{J} + (\nabla \mathbf{J})\mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{J} - \mathbf{J}(\nabla \mathbf{u})^T; \quad (\text{A.6})$$

(b) Derivada Convectada Inferior:

$$\overset{\Delta}{\mathbf{J}} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{J} + (\nabla \mathbf{J})\mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})\mathbf{J} + \mathbf{J}(\nabla \mathbf{u})^T, \quad (\text{A.7})$$

onde \mathbf{J} é um tensor de ordem 3. A notação com Δ sobrescrito para a derivada convectada superior e ∇ sobrescrito para a derivada convectada inferior é mesma usada por Astarita e Marrucci, 1974, Pg. 94.

A.2 Identidades

1. Para os campos vetoriais \mathbf{a} e \mathbf{b} , tem-se

$$\nabla(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = \nabla \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b}. \quad (\text{A.8})$$

2. Para qualquer campo escalar α e um campo vetorial \mathbf{a} , tem-se

$$\nabla(\alpha \mathbf{a}) = \alpha \operatorname{div}(\mathbf{a}) + \mathbf{a} \cdot \nabla \alpha. \quad (\text{A.9})$$

3. Para os campos vetoriais \mathbf{a} e \mathbf{b} , tem-se

$$\operatorname{div}(\mathbf{a}\mathbf{b}) = \mathbf{a} \operatorname{div}(\mathbf{b}) + (\nabla \mathbf{a})\mathbf{b}. \quad (\text{A.10})$$

4. Para qualquer campo tensorial simétrico \mathbf{A} e um campo vetorial \mathbf{a} , tem-se

$$\operatorname{div}(\mathbf{A}\mathbf{a}) = \mathbf{a} \cdot \operatorname{div}(\mathbf{A}) + \mathbf{A} : \nabla \mathbf{a}. \quad (\text{A.11})$$

5. Para qualquer campo escalar α e um campo tensorial simétrico \mathbf{A} , tem-se

$$\operatorname{div}(\alpha \mathbf{A}) = \alpha \operatorname{div}(\mathbf{A}) + \mathbf{A} \nabla \alpha. \quad (\text{A.12})$$