

5

Resultados numéricos

Neste capítulo serão explorados os principais resultados numéricos obtidos no presente trabalho. Isso será feito de forma integrada com as teorias desenvolvidas e também com resultados experimentais disponíveis na literatura. Inicialmente, uma análise de convergência de malha é realizada. Nessa etapa, a referência utilizada é a teoria assintótica para emulsões de alta razão de viscosidade. Em regimes de razões de viscosidade moderadas e mesmo baixas, resultados experimentais obtidos na literatura fornecerão o suporte quantitativo para avaliar o desempenho do código desenvolvido na previsão da forma da gota. Utilizando essa ferramenta numérica a reologia de emulsões com $\lambda \sim 1$ será estudada. Resultados para o cisalhamento simples serão empregados no estudo do escoamento de emulsões através de tubos, integrando a técnica numérica com uma aplicação típica de situações práticas. Do ponto de vista fenomenológico, emulsões de razão de viscosidade próximas da unidade serão estudadas em cisalhamento oscilatório, mostrando regimes não-lineares promovidos pelas altas deformações das gotas na microescala do escoamento.

5.1

Estudo de convergência de malha

Cada simulação realizada neste trabalho corresponde a uma evolução temporal da superfície da gota a partir de uma condição inicial arbitrária. Dessa maneira, é necessário um método que detecte quando os efeitos do transiente inicial não afetam mais a geometria da gota. No caso de escoamentos permanentes, as derivadas de D_1 , D_2 e θ são monitoradas e a execução é interrompida quando seu valor absoluto é menor do que uma tolerância. Para o cálculo da derivada, uma reta é ajustada aos últimos pontos da série temporal da quantidade geométrica que se está monitorando. Considera-se que não há mais variação temporal, quando o valor absoluto da inclinação dessa reta e o resíduo da regressão linear são menores do que uma determinada tolerância. Foram utilizadas tolerâncias de 1% do valor absoluto atual de D_1 ,

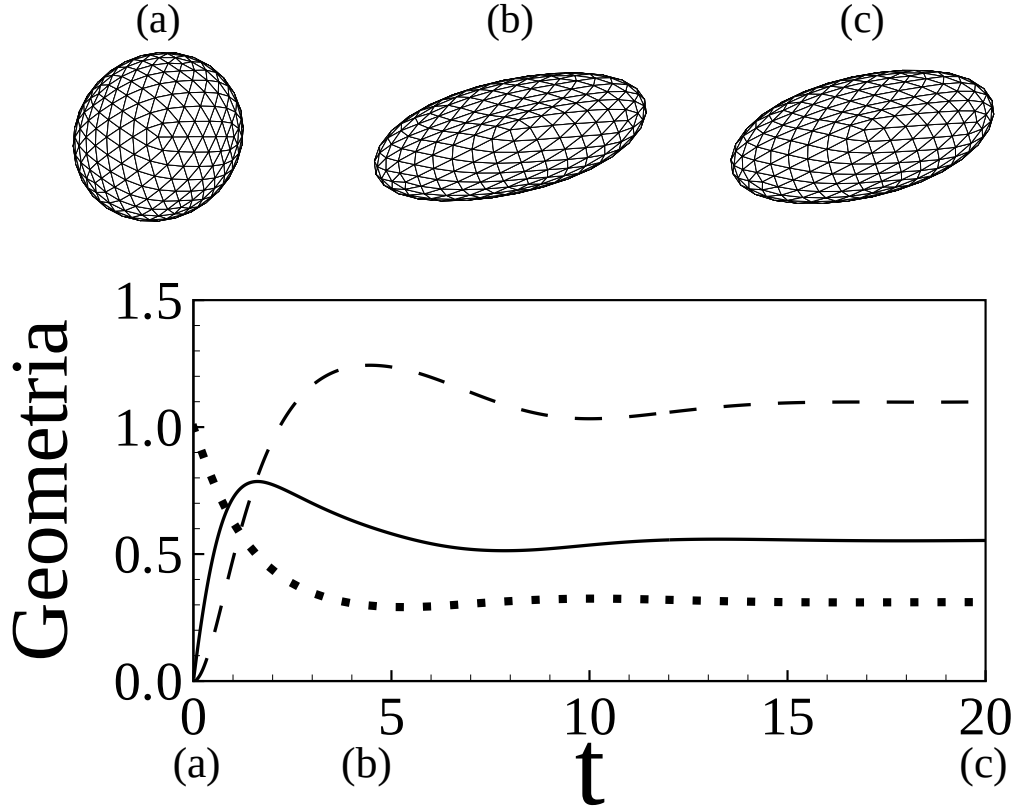


Figura 5.1: Transiente inicial da evolução da forma da superfície da gota em cisalhamento simples. $Ca_\lambda = 3/2$, $\lambda = 2$. Linha cheia: λD_1 ; Linha tracejada: λD_2 ; Linha pontilhada: $4\theta/\pi$. Os encartes (a), (b) e (c) mostram o formato da gota em três instantes diferentes, respectivamente anotados na abscissa do gráfico.

D_2 e θ . Na figura (5.1) são apresentados resultados de uma simulação em que a gota é submetida a um regime de escoamento próximo daquele que provocaria sua ruptura. É possível observar como os transientes iniciais podem ser complexos e duradouros, já que cada unidade na abscissa corresponde a um tempo adimensional. A duração do transiente inicial cresce com a razão de viscosidade, podendo chegar a mais de cem tempos de relaxação da gota para $\lambda \gg 1$. Vale ainda alertar para o fato de que em determinadas situações, mesmo que o escoamento imposto longe da gota seja permanente, não é possível chegar à uma forma estacionária para sua superfície. Isso ocorre em condições de ruptura. É notável também o fato de que a maior deformação no caso da simulação da figura (5.1) não acontece na forma estacionária da superfície.

Os testes de convergência de malha realizados seguem a mesma metodologia utilizada classicamente na maioria dos trabalhos com métodos numéricos que envolvem uma discretização espacial. Nesse contexto, parâmetros globais do problema são monitorados enquanto o refinamento é aumentado, até que a malha não mais influa na resposta do código. A referência é a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$

apresentada no capítulo 4, seção 4.6. Haja vista ser essa teoria válida apenas para emulsões diluídas tais que $\lambda \gg 1$, o primeiro caso teste deve ser configurado de forma a obedecer esta restrição. Entretanto, nesse limite, ainda que em altos números de capilaridade, as deformações da gota são muito discretas. Essa situação faz com que o código numérico tenha que ser capaz de capturar variações muito pequenas da geometria em relação à forma esférica inicial da gota, o que nos leva a especular que nessa situação o refinamento da malha deva ser intenso. Tal conjectura contraria uma primeira possível impressão do problema, quando o mesmo é visto pela ótica de que em altas razões de viscosidade há pequena deformação. Isso sugere que não há necessidade de se refinar a malha, já que a forma da gota é praticamente esférica. Porém, como será visto adiante, esse fato não se confirma quando os resultados são analisados quantitativamente e, em princípio, é necessário uma malha muito fina para prever numericamente a reologia de emulsões de alta razão de viscosidade. Geralmente os limites assintóticos de problemas físicos são condições críticas para simulações numéricas e experimentos. Esse fato mostra a necessidade e importância de soluções assintóticas em regimes de pequenas deformações.

Para uma gota com $\lambda = 50$ foram realizadas simulações em três regimes de taxa de cisalhamento diferentes ($Ca_\lambda = 1/10$, $Ca_\lambda = 1$ e $Ca_\lambda = 10$), com quatro malhas de refinamentos diferentes ($N_\Delta = 720$, $N_\Delta = 1280$, $N_\Delta = 2000$ e $N_\Delta = 2880$). Para essa razão de viscosidade e essa faixa de taxa de cisalhamento, a maior diferença entre as teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ acontece na previsão de D_1 em $Ca_\lambda = 10$, e é igual a 4%. Na figura (5.2) apresenta-se o valor de λD_2 em função do inverso do número de elementos da malha. Chama a atenção no gráfico que os pontos pertencem a uma reta. Uma análise de regressão linear confirma esse resultado, uma vez que o coeficiente de correlação entre os pontos da simulação e a reta ajustada é exatamente um (a menos de variações na ordem da representação numérica digital). O coeficiente linear do gráfico da figura (5.2) é resultado de uma extrapolação que pretende prever o valor de λD_2 para uma malha de infinitos elementos. Como pode ser visto nas anotações feitas no gráfico, a diferença entre o que foi previsto pela teoria de pequenas deformações e o Método Integral de Contorno (MIC) é de aproximadamente 0,07%. Para os demais valores de Ca_λ e considerando também as outras grandezas associadas à geometria da gota, o mesmo comportamento foi observado. O maior desvio entre a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e a previsão numérica associada ao procedimento de extrapolação exposto foi de 0,13% e ocorreu para $4\theta/\pi$, em $Ca_\lambda = 10$.

As grandezas associadas à tensão induzida pela fase dispersa mostraram-se mais sensíveis à densidade da malha. No entanto, comportamento seme-

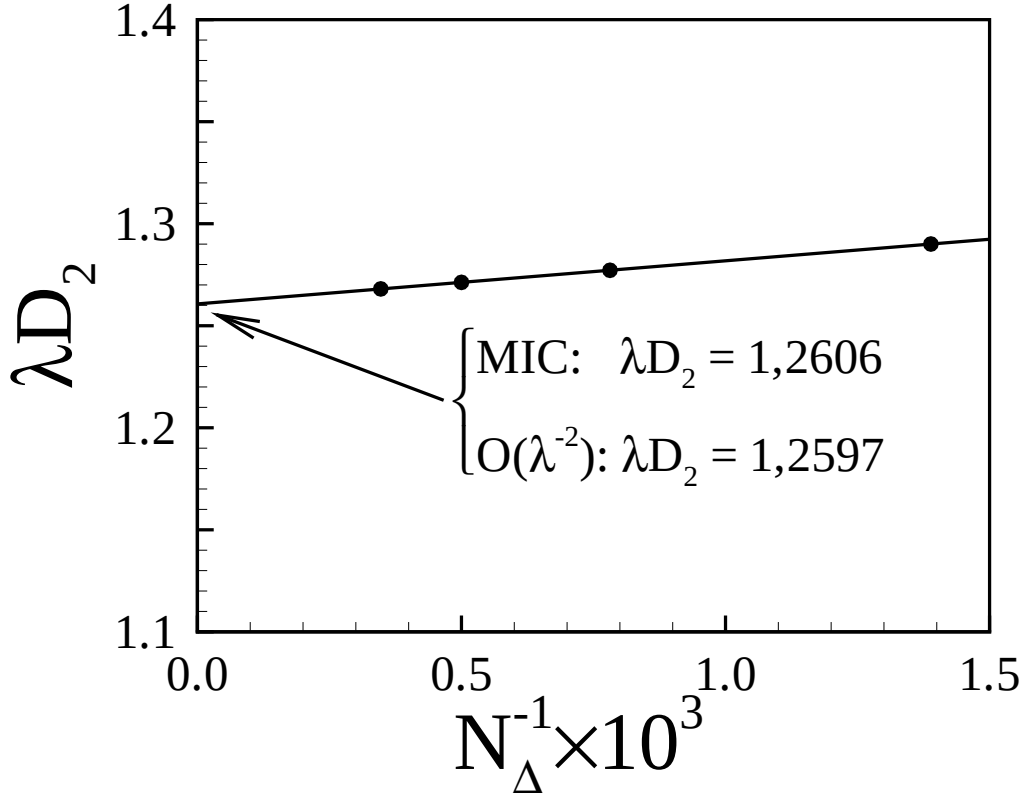


Figura 5.2: Teste de convergência da malha. $Ca_{\lambda} = 10$, $\lambda = 50$. Resultado da regressão linear: $\bar{y} = 0,0211x + 1,2607$; $Cov(y, \bar{y}) = 1$, em que $\bar{y}$ é o valor de y ajustado pela regressão linear e Cov é a covariância normalizada.

lhante ao observado para λD_1 , λD_2 e $4\theta/\pi$ também ocorre para $\lambda(\mu_{ap} - \mu_B)/\phi$, $\lambda N_1/\phi$ e $\lambda N_2/\phi$. Para essas funções viscométricas, em qualquer taxa de cisalhamento, as regressões lineares nos gráficos de convergência de malha mostram retas perfeitas. Nesse caso, a referência passa a ser a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$, desde que uma teoria de segunda ordem fechada para a tensão não está consolidada. Na figura (5.3) são apresentados para o teste de convergência de malha quanto à variação da viscosidade aparente. Essa situação foi a que gerou maior discrepância relativa entre as respostas numérica e da teoria, desde que o valor predito pelo código é praticamente o dobro da viscosidade obtida pela teoria. Entretanto, como isso ocorre para valores próximos do zero, variações relativas não são indicadores de erros adequados. Para as diferenças de tensões normais, a maior variação observada é inferior a 4%. Considerando que os desvios entre as teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ é dessa mesma magnitude para $Ca_{\lambda} = 10$, as pequenas discrepâncias entre as respostas numérica e da teoria podem ser consideradas aceitáveis.

Comparando os resultados das regressões lineares apresentados nas legendas das figuras (5.2) e (5.3) é possível confirmar a conjectura da página 153, §2. Observamos que a inclinação da reta ajustada à viscosidade é cerca

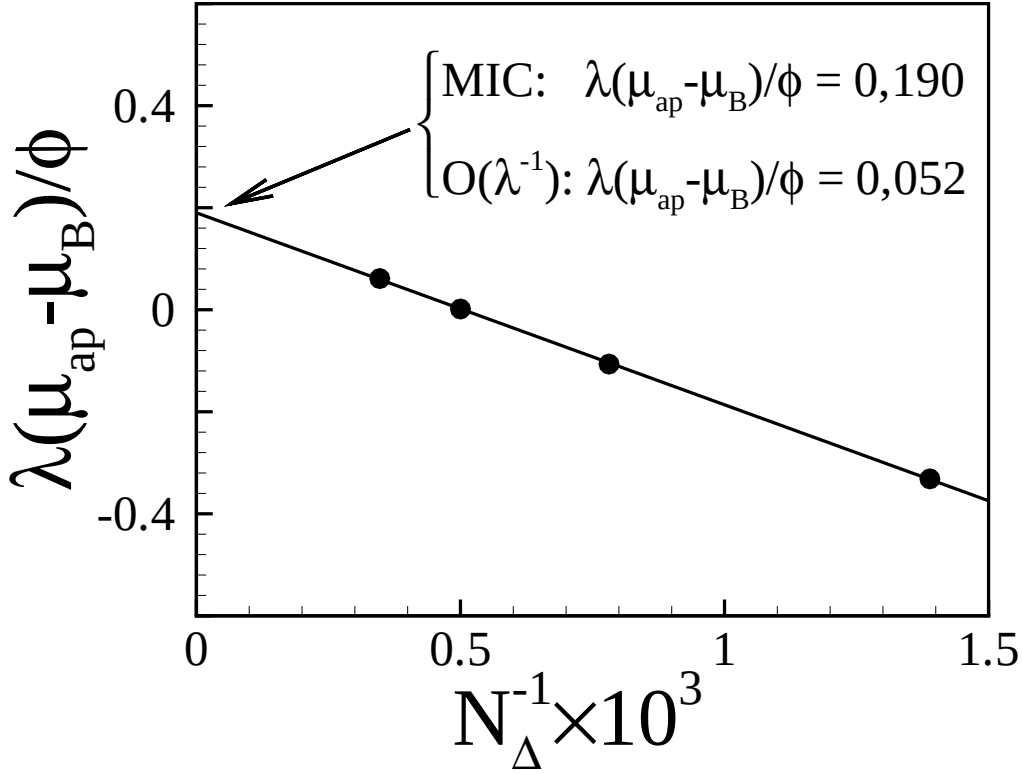


Figura 5.3: Teste de convergência de malha. $Ca_{\lambda} = 10$, $\lambda = 50$. Resultado da regressão linear: $\bar{y} = -0,3763x + 0,1900$; $Cov(y, \bar{y}) = 1$, em que $\bar{y}$ é o valor de y ajustado pela regressão linear e Cov é a covariância normalizada.

de trinta vezes maior do que no caso de λD_2 . Portanto, podemos concluir que a viscosidade é mais sensível ao refinamento da malha do que λD_2 . De fato, comparações semelhantes entre as demais variáveis do problema confirmam esse resultado. Assim sendo, para um bom cálculo da reologia de emulsões em altas razões de viscosidade é preciso, *a priori*, uma malha muito refinada. No entanto, considerando a grande regularidade das regressões lineares, um procedimento alternativo pode ser delineado. Ao invés de se realizar uma única simulação com uma malha muito fina, realizam-se duas rodadas com malhas mais grossas, porém de refinamento distinto. Finalmente, uma reta é ajustada a cada par de resultados, da mesma forma como se fez nas análises de convergência de malha anteriores. Esse procedimento mostrou-se eficaz na economia de tempo computacional e na melhora dos resultados numéricos. Se considerarmos, por exemplo, o tempo de execução de dois casos com malhas de $N_{\Delta} = 500$ e $N_{\Delta} = 720$ juntos, esse seria ainda dez vezes menor do que uma única execução com uma malha de $N_{\Delta} = 2880$. Usando a extrapolação pela regressão linear o resultado das duas simulações com malhas grossas estaria ainda mais próximo do valor obtido com a teoria de pequenas deformações.

Para que o procedimento de extrapolação por regressão linear utilizando

apenas resultados de dois casos possa ser aplicado maneira geral, é preciso verificar sua validade para gotas com valores diferentes de λ . A realização dessa tarefa de forma extensiva, para uma faixa de razão de viscosidade ampla não é objetivo deste trabalho. No entanto, para $\lambda \sim 1$, que é o regime que se pretende explorar com o método numérico, tal investigação é necessária. Para suprir essa demanda, foram realizadas simulações em que $\lambda \in \{5, 10, 20\}$ e $Ca_\lambda \in \{1/10, 1, 10\}$, perfazendo todos os arranjos dois a dois possíveis entre esses dois conjuntos. Aqui não há uma referência teórica que sirva como base de comparação. Porém, em todos os casos os gráficos de propriedades (geométricas ou reológicas) contra o inverso do número de elementos resultam retas perfeitas. Para exemplificar esse fato, na figura (5.4)

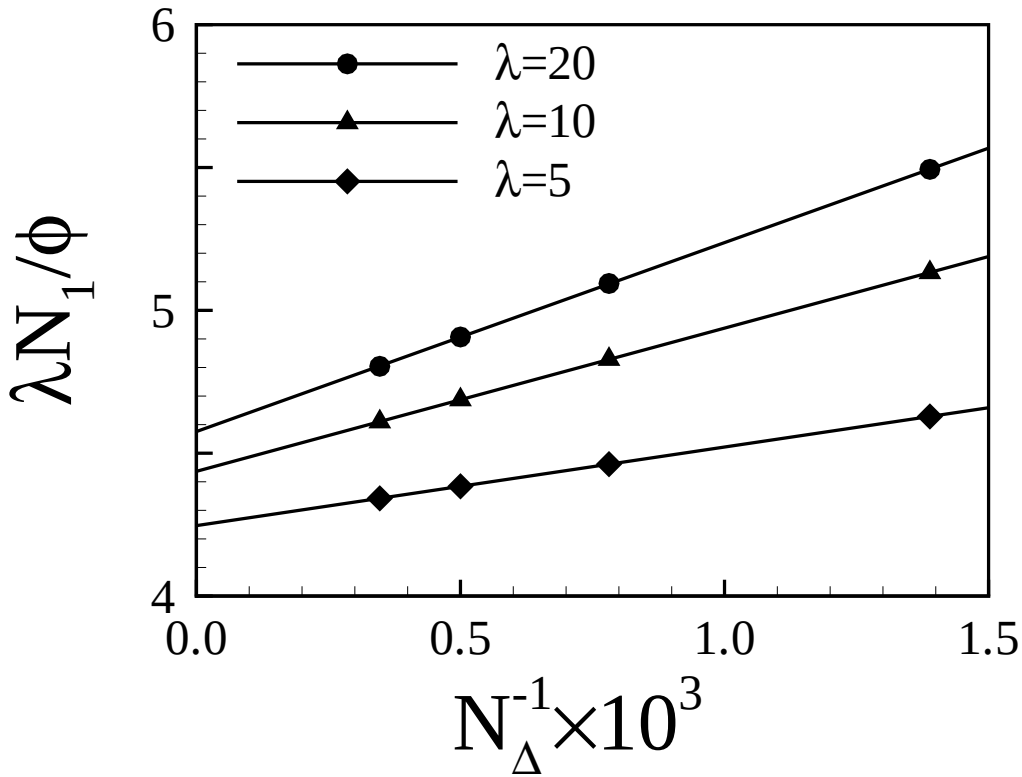


Figura 5.4: Sensibilidade de $\lambda N_1/\phi$ quanto ao refinamento da malha para $Ca_\lambda = 1$.

apresenta-se os resultados dos estudos de convergência de malha usando agora $\lambda N_1/\phi$ como referência. Podemos observar também que à medida que o valor de λ diminui, a inclinação da reta tende a ficar cada vez menor. Isso indica que para razões de viscosidade maiores, há menor dependência dos resultados em relação ao refinamento da malha. No entanto, é importante ressaltar que em configurações tais que as deformações sejam da ordem do raio, ou em casos em que a gota tende a romper-se, uma malha refinada é indispensável para um cálculo acurado. A origem do comportamento linear da resposta do

programa em relação ao inverso do número de pontos é consequência direta da regra de integração numérica utilizada nos cálculos numéricos. Do ponto de vista numérico, o Método Integral de Contorno está baseado na resolução aproximada de certas integrais de superfície. Neste trabalho utilizou-se a regra do trapézio para realizar essa tarefa. Desde que esse método é $\mathcal{O}(N_{\Delta}^{-1})$, segue que os resultados das integrações numéricas dependem linearmente do inverso do número de elementos.

A presente análise de convergência encoraja a adoção do seguinte procedimento. Para cada caso, são executadas duas simulações com malhas de refinamentos diferentes. Para cada par de resultados uma reta é ajustada. As variáveis dependentes e independentes são N_{Δ}^{-1} e a propriedade que se deseja determinar, respectivamente. A resposta da simulação para cada caso é tomada como sendo o coeficiente linear da reta, ou seja o valor previsto pela reta ajustada quando $N_{\Delta}^{-1} = 0$, ou ainda quando $N_{\Delta} \rightarrow \infty$.

5.2

Comparação com resultados experimentais

Para dar suporte quantitativo aos resultados obtidos com o Método Integral de Contorno foram realizadas comparações com dados experimentais disponíveis na literatura. Uma das possibilidades nesse caso é verificar o comportamento do programa em regimes de baixas e moderadas razões de viscosidade, o que não é possível utilizando apenas as teorias desenvolvidas. No trabalho de Torza *et.al.* (1972) a deformação de gotas é estudada em diferentes regimes de taxa de cisalhamento. São medidas a deformação de Taylor, definida na equação (3-13)¹, e a orientação da gota em relação à direção do escoamento. São apresentados resultados para $\lambda = 3,6$ e $\lambda = 0,08$. Para $\lambda = 3,6$ o programa foi testado em uma situação típica de interesse desse trabalho, próxima do limite de aplicação da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$. Observe que nesse caso, utiliza-se o número de capilaridade baseado na viscosidade da gota, Ca_{λ} . Já para a situação em que $\lambda = 0,08$, utiliza-se o número de capilaridade baseado na viscosidade do fluido ambiente. As malhas empregadas nas simulações têm, respectivamente $N_{\Delta} = 720$ e $N_{\Delta} = 1280$, e o procedimento de extrapolação de resultados para $N_{\Delta} \rightarrow \infty$, descrito na seção 5.1, foi empregado. Podemos observar na figura (5.5) que os resultados numérico e experimental concordam de forma satisfatória. Tão significativo quanto isso, é o fato da resposta do MIC tender assintoticamente à solução clássica de Taylor (1934), como pode

¹Para referência: $D_T = \frac{L - B}{L + B}$, em que L e B são o maior e o menor semi-eixos da gota.

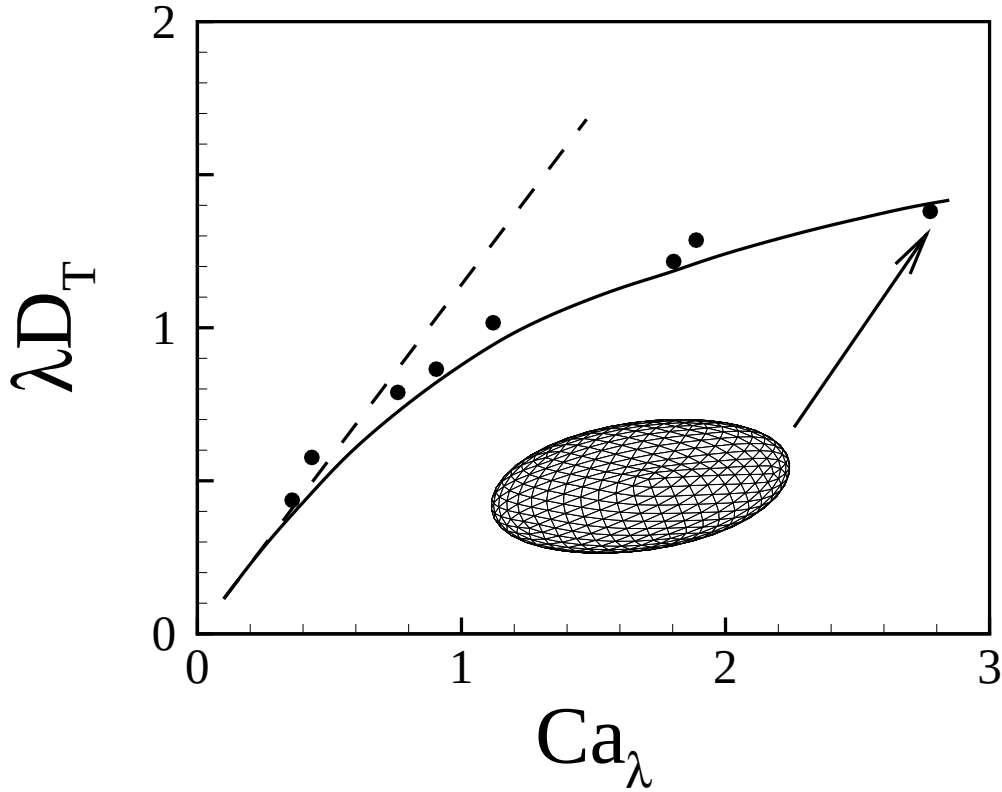


Figura 5.5: Deformação da gota em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 3, 6$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Torza *et.al.* (1972); linha pontilhada: teoria $\mathcal{O}(Ca)$ obtida por Taylor (1934); linha cheia: Método Integral de Contorno.

ser visto pelo colapso entre as linhas cheias e pontilhadas. Não são apresentados nessa figura resultados das teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ para evitar o acúmulo de linhas no gráfico, dificultando a visualização dos resultados. Porém, adiante neste mesmo capítulo serão realizadas comparações entre resultados numéricos do MIC e resultados das teorias assintóticas. Na figura (5.6) observa-se que também quanto à orientação da gota em relação ao escoamento os resultados numérico e experimental de Torza *et.al.* (1972) concordam. Ressalta-se o fato de que a teoria de Taylor (1934) e também as teorias desenvolvidas neste trabalho prevêem que no limite de baixos números de capilaridade a gota tende a orientar-se a 45° em relação à direção do escoamento. Esse resultado também é recuperado pelo código numérico apresentado.

Os mesmos comentários feitos para o caso em que $\lambda = 3, 6$ valem para $\lambda = 0, 08$, cujos resultados seguem nas figuras (5.7) e (5.8). Chama-se a atenção para o fato de que no caso da inclinação da gota em relação à direção do escoamento, o código numérico superestimou ligeiramente o valor de θ , em relação ao experimento. No entanto, ainda que isso tenha ocorrido, não se considerou esse fato como elemento que colocasse suspeita sobre a

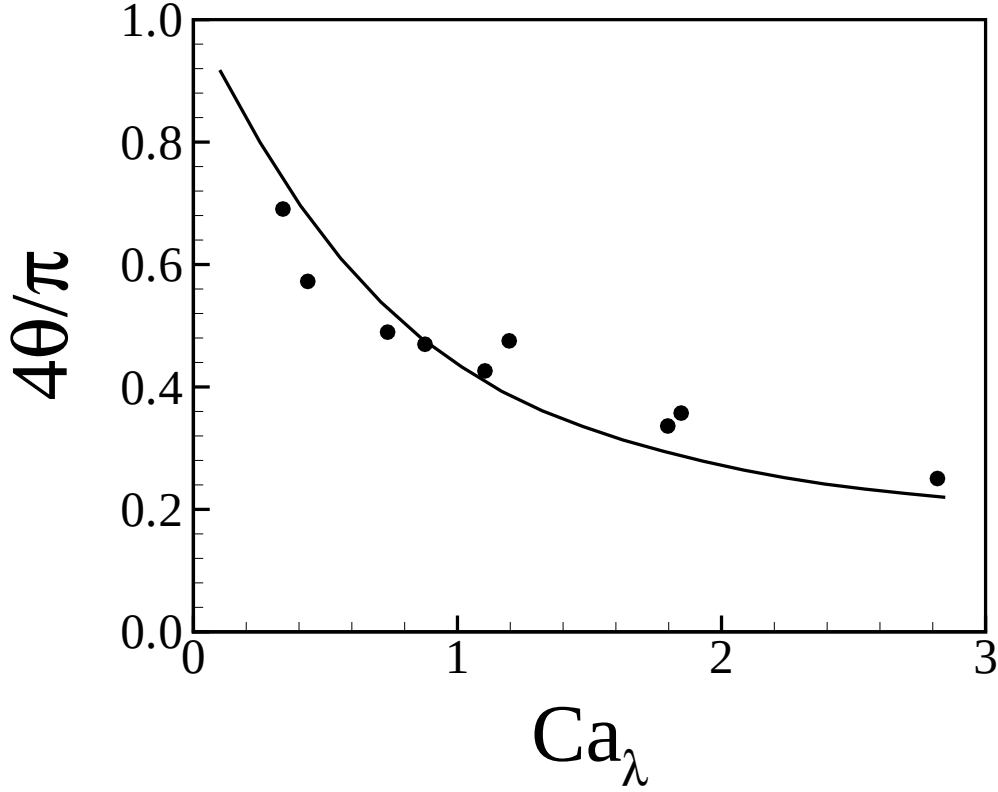


Figura 5.6: Orientação da gota em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 3, 6$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Torza *et.al.* (1972); linha cheia: Método Integral de Contorno. Segundo Taylor (1934) se $Ca_\lambda \rightarrow 0$ então $4\theta/\pi \rightarrow 1$.

acurácia do cálculo numérico, considerando também que as incertezas dos dados experimentais usados não são conhecidas.

No trabalho de Bentley & Leal (1986) a forma da gota é estudada em um escoamento hiperbólico tal que

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{(1+\chi)}{2}(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2) \\ \mathbf{W} &= \frac{(1-\chi)}{2}(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1). \end{aligned} \quad (5-1)$$

No aparato desenvolvido para a tomada das medidas reométricas era possível variar o valor de χ no intervalo $[0, 1]$, tal que o escoamento pode variar desde a condição de pura extensão ($\chi = 1$) até a condição de cisalhamento simples ($\chi = 0$), continuamente. Essa possibilidade permite que a gota seja submetida a escoamentos complexos do ponto de vista viscométrico. Nas figuras (5.9) e (5.10) podemos observar comparações entre os resultados numérico e experimental para um escoamento próximo de um cisalhamento simples. Nesse caso observa-se uma excelente concordância entre as previsões

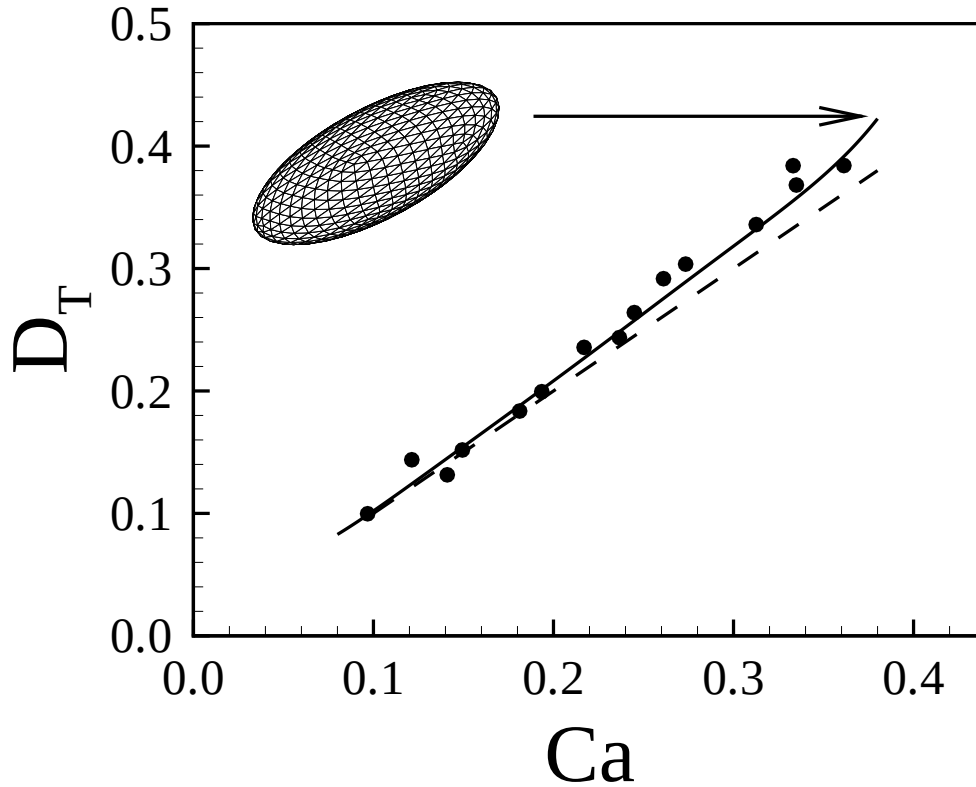


Figura 5.7: Deformação da gota em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 0,08$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Torza *et.al.* (1972); linha pontilhada: teoria $\mathcal{O}(Ca)$ obtida por Taylor (1934); linha cheia: Método Integral de Contorno.

numéricas e os resultados experimentais para a deformação em função da taxa de cisalhamento. A razão de viscosidade da gota pertence à uma faixa em que as teorias de pequenas deformações não são válidas, fornecendo uma referência importante para o Método Integral de Contorno. No caso da orientação da gota apresentada na figura (5.10), percebe-se um maior espalhamento dos pontos experimentais em relação aos demais gráficos. A linha cheia referente ao resultado numérico correspondente, nitidamente, pertence à nuvem de pontos obtidos por Bentley & Leal (1986).

As figuras (5.11) e (5.12) apresentam resultados para a deformação da gota em função do número de capilaridade em escoamento de pura extensão. Observamos mais uma vez a boa concordância entre os resultados numérico e experimental. A ausência de vorticidade no escoamento faz com que esse atue intensamente sobre a gota, causando grandes deformações mesmo em números de capilaridades pequenos quando comparados com o cisalhamento simples. Dessa forma, sobretudo para o caso de $\lambda = 2,8$, o programa não pôde simular casos em que $Ca_\varepsilon > 0,31$, que também não foram reportados no trabalho experimental de referência. Para isso seria necessário empregar-se

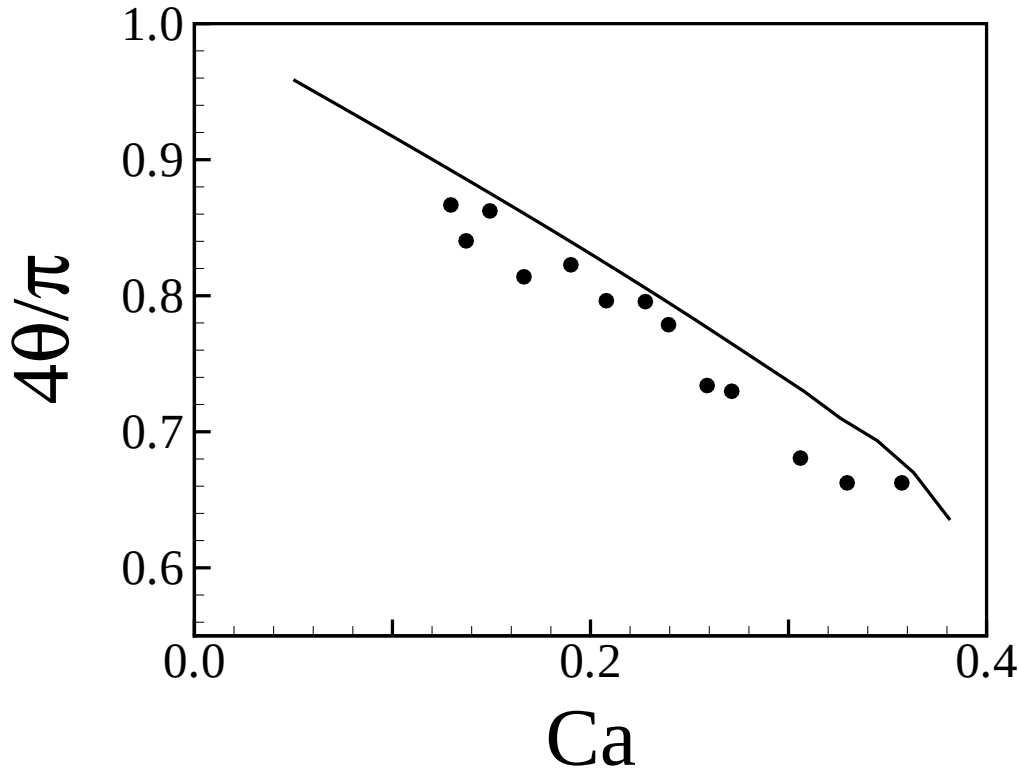


Figura 5.8: Orientação da gota em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 0,08$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Torza *et.al.* (1972); linha cheia: Método Integral de Contorno. Segundo Taylor (1934) se $Ca_\lambda \rightarrow 0$ então $4\theta/\pi \rightarrow 1$.

um procedimento de adaptação de malha com variação de topologia, tal que pontos pudessem ser adicionados e retirados de determinados locais da gota, segundo critérios a serem definidos. Além desse limite a gota está próxima do limite de ruptura, o que limitou também o trabalho experimental (Bentley & Leal, 1986). Também a ausência de vorticidade para gotas de alta razão de viscosidade faz com que as mesmas estejam sempre alinhadas na direção do escoamento para qualquer taxa de extensão, implicando na não necessidade de se examinar o comportamento de θ .

As comparações anteriores permitem concluir que o código numérico desenvolvido é capaz de prever satisfatoriamente a forma de uma gota para o caso de razões de viscosidade moderadas, em escoamentos de pura extensão e cisalhamento simples, pelo menos quanto à D_T e orientação da gota. Resultados experimentais que permitissem a comparação das previsões para a tensão induzida pela fase dispersa no fluido ambiente não foram encontrados em nossas pesquisas bibliográficas. Entretanto, entende-se que esse ponto não é de grande complexidade, uma vez que compreende apenas o cálculo de uma integral de superfície explícita e sem problemas de regularidade, fora

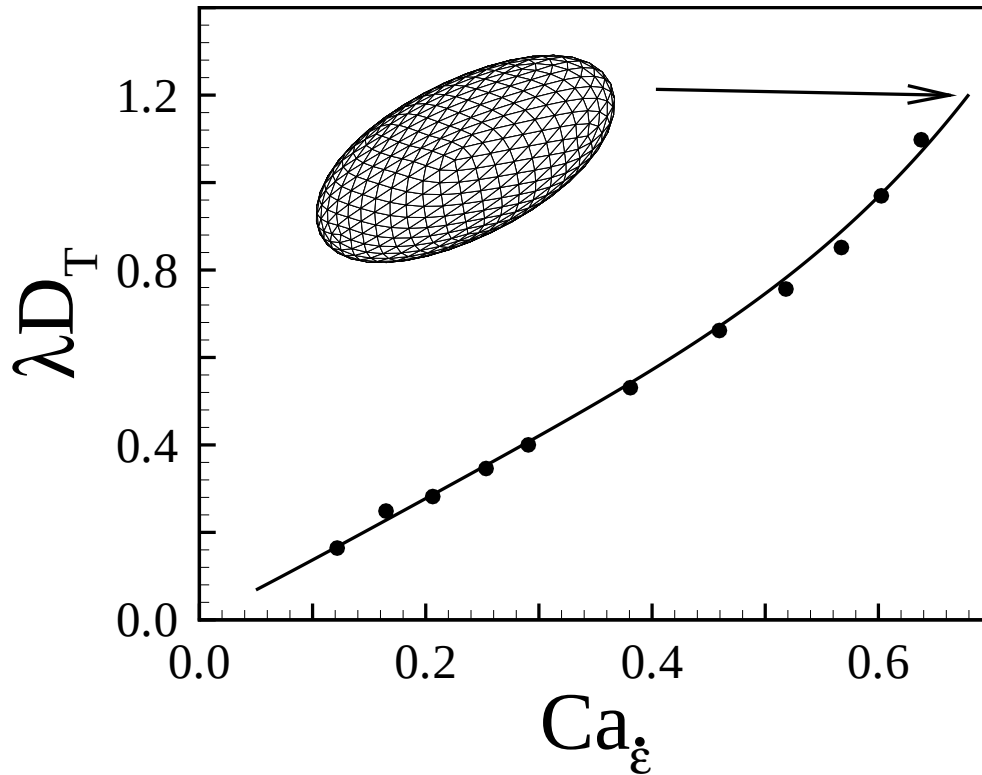


Figura 5.9: Deformação da gota em função do número de capilaridade em escoamento combinado entre pura extensão e cisalhamento simples. $\lambda = 2, 8$, $\chi = 0, 2$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Bentley & Leal (1986); Linha: Método Integral de Contorno.

de qualquer processo de iterativo. Em outras palavras, o cálculo do tensor de Landau-Batchelor é visto como uma etapa de pós-processamento do cálculo numérico principal. Ainda assim, na seção seguinte, um estudo comparativo entre as teorias desenvolvidas no presente trabalho e os resultados numéricos resultantes do Método Integral de Contorno será apresentada. Nesse contexto, comparações mais ricas, envolvendo tanto grandezas associadas à geometria da gota como à reologia da emulsão podem ser realizadas.

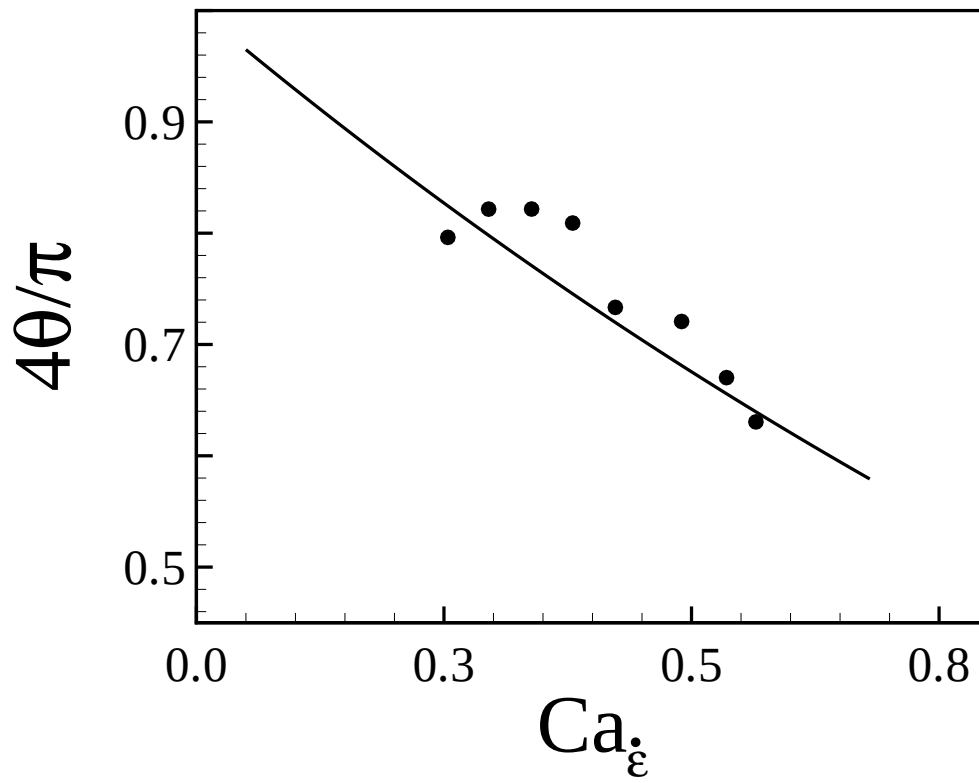


Figura 5.10: Orientação da gota em função do número de capilaridade em escoamento combinado entre pura extensão e cisalhamento simples. $\lambda = 2, 8$, $\chi = 0, 2$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Bentley & Leal (1986); Linha: Método Integral e Contorno.

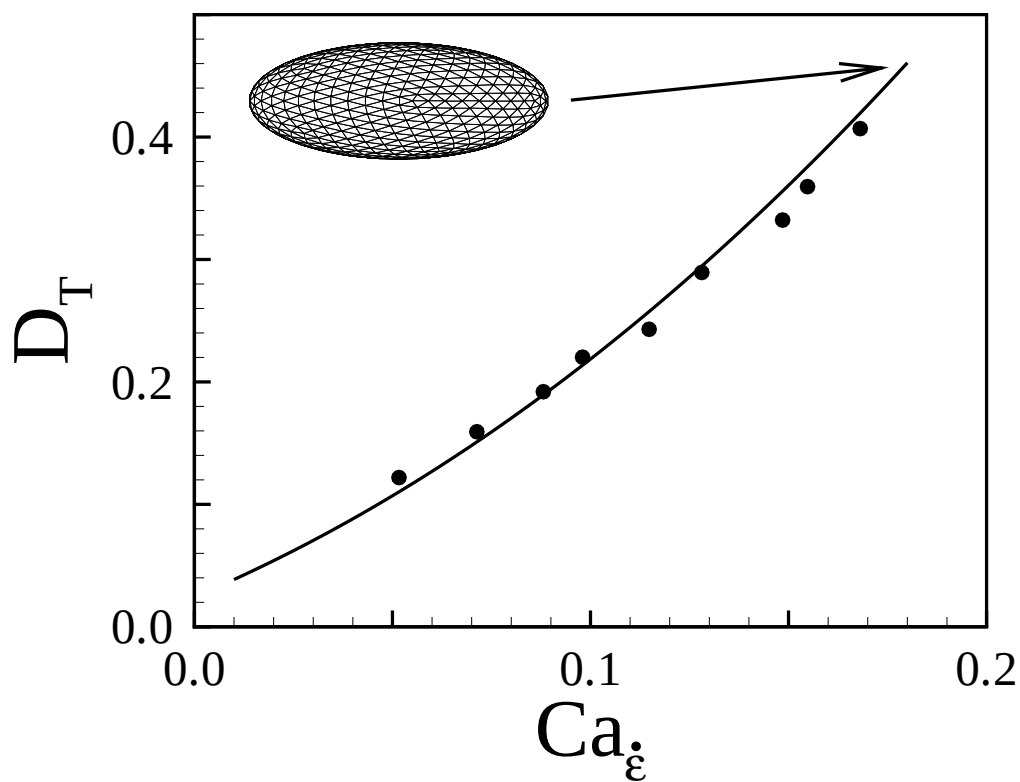


Figura 5.11: Deformação da gota em função do número de capilaridade em escoamento de pura extensão. $\lambda = 0,12$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Bentley & Leal (1986); Linha: Método Integral de Contorno.

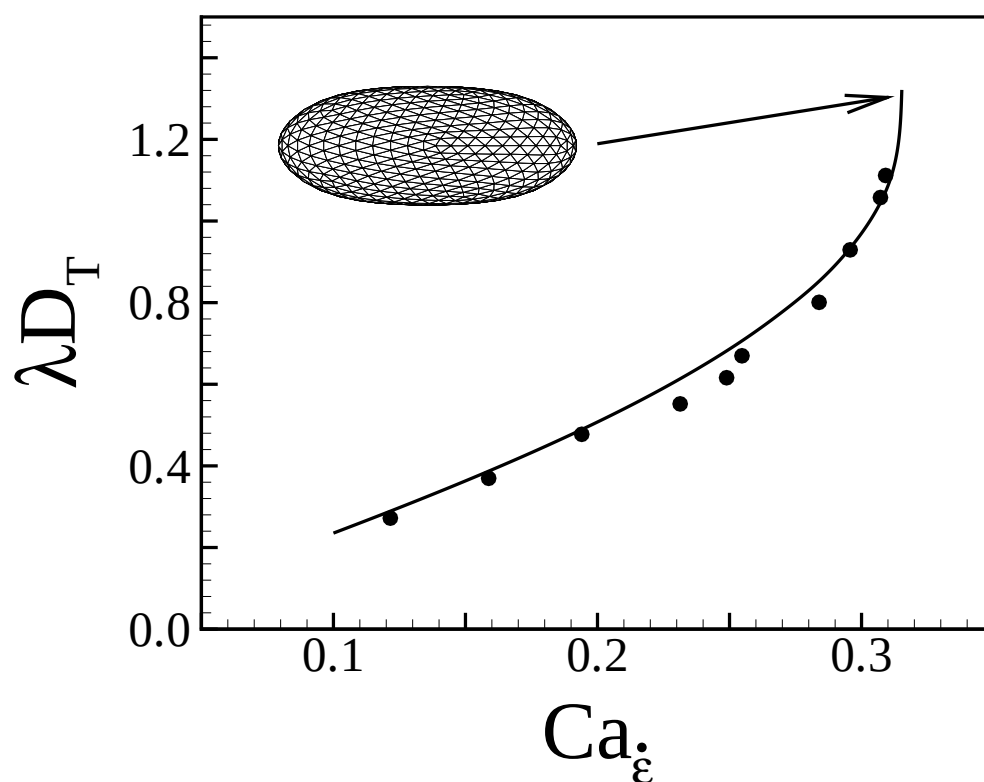


Figura 5.12: Deformação da gota em função do número de capilaridade em escoamento de pura extensão. $\lambda = 2,8$. Pontos: resultados experimentais obtidos por Bentley & Leal (1986); Linha: Método Integral e Contorno.

5.3

Comparação com teorias de pequenas deformações

Nesta seção serão feitas comparações entre os resultados numéricos e os obtidos com as teorias de pequenas deformações desenvolvidas ao longo do trabalho. Serão abordados os escoamentos de cisalhamento simples, pura extensão e cisalhamento oscilatório. No primeiro caso, além das comparações propriamente ditas, dados obtidos das simulações numéricas serão utilizados para calibrar os coeficientes da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, referente à tensão induzida pela fase dispersa. Nessa perspectiva estabelece-se uma integração entre a simulação pelo Método Integral de Contorno e a teoria de pequenas deformações, de forma que a segunda é complementada pela primeira. A teoria e o Método Integral de Contorno são comparados em um escoamento de pura extensão, mostrando que os coeficientes materiais determinados pela calibração são válidos também para esse caso. O mesmo vale para os resultados referentes às simulações da emulsão sujeita a cisalhamento oscilatório. Mostra-se que constantes materiais determinadas para escoamento cisalhantes permanentes podem ser usadas em escoamentos cisalhantes transientes e escoamentos extensionais.

5.3.1

Cisalhamento simples

Para as comparações de resultados referentes a escoamentos cisalhantes simples selecionou-se uma emulsão de razão de viscosidade $\lambda = 10$. Foram realizadas 100 simulações numéricas, logarithmicamente distribuídas no intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10^1]$. Nessas condições, o comportamento das quantidades geométricas em função do número de capilaridade pode ser observado na figura (5.13). Podemos observar que a teoria assintótica e o método numérico têm um comportamento similar para a razão de viscosidade escolhida, em todo o intervalo de taxa de cisalhamento simulado. Uma comparação quantitativa dos desvios entre esses resultados pode ser vista na tabela (5.1). Nela são mostrados os desvios máximos e médios para cada uma das grandezas analisadas. Essa comparação permite concluir que esse caso pode ser usado para se determinar as constantes materiais $\mathcal{C}_i$, para $i = 1 \dots 6$, da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ para a tensão, conforme explanado na seção 4.6. Espera-se assim que a teoria calibrada em função dos resultados das simulações diretas recupere a resposta do material com precisão pelo menos igual àquela obtida nas comparações entre resultados para a deformação da gota.

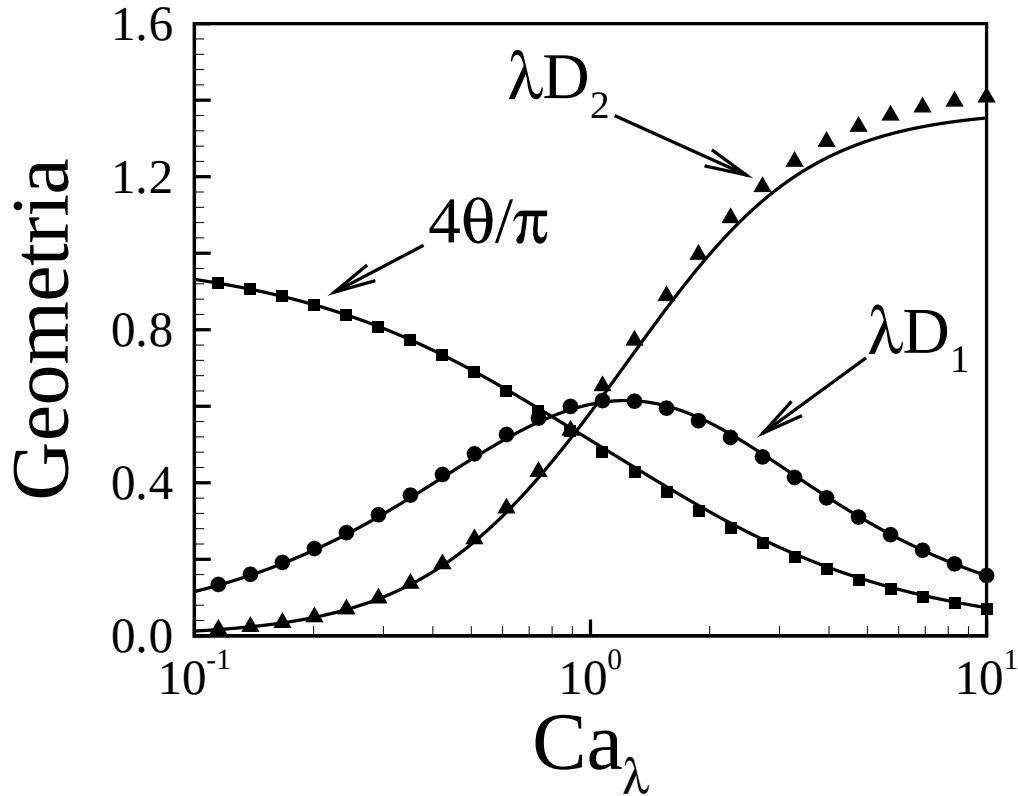


Figura 5.13: Comparação entre os resultados para geometria da gota obtidos pela teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e pelo Método Integral de Contorno, em cisalhamento simples e $\lambda = 10$. Círculos: λD_1 ; triângulos: λD_2 ; quadrados: $4\theta/\pi$; linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$.

Tabela 5.1: Desvios relativos entre as previsões numérica, pelo Método Integral de Contorno, e teórica, pela teoria assintótica $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, para gotas de $\lambda = 10$, no intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10^1]$.

Grandeza geométrica	Desvio relativo máximo	Desvio relativo médio
λD_1	2,01% ($Ca_\lambda = 0,53$)	1,24%
λD_2	4,10% ($Ca_\lambda = 1,00$)	2,90%
$4\theta/\pi$	4,36% ($Ca_\lambda = 2,36$)	2,05%

Realizando esse procedimento e representado os coeficientes na forma racional, porém mantendo uma precisão de pelo menos seis algarismos significativos, obtém-se

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_1 &= \frac{73}{10}, \quad \mathcal{C}_2 = -\frac{11187}{875}, \quad \mathcal{C}_3 = -\frac{419}{250}, \\ \mathcal{C}_4 &= \frac{12}{5}, \quad \mathcal{C}_5 = -\frac{142}{25}, \quad \mathcal{C}_6 = -\frac{4}{7}. \end{aligned} \quad (5-2)$$

O resultado obtido com o procedimento de calibração pode ser visto na figura (5.14). Nesse gráfico são mostradas as previsões numéricas, pelo Método Integral de Contorno, e teóricas $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, para a reologia da emulsão. No caso da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ são mostrados resultados obtidos utilizando os coeficientes $\mathcal{C}_i$ calibrados usando resultados do MIC e obtidos diretamente do método de perturbação regular, sem calibração. Podemos observar que a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ sem a calibração afasta-se, em relação à teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$, da solução numérica. Em contrapartida, após a calibração obtemos uma teoria

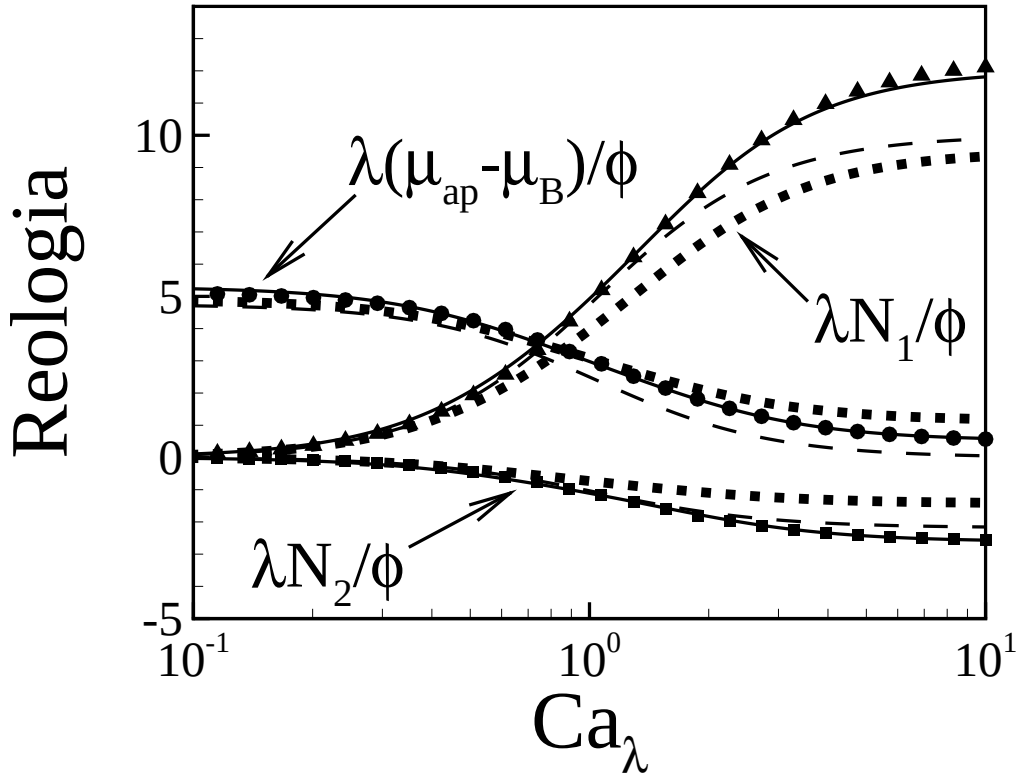


Figura 5.14: Comparação entre os resultados para reologia da emulsão obtidos pelas teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e pelo Método Integral de Contorno, em cisalhamento simples e $\lambda = 10$. Símbolos representam resultados numéricos sendo que círculos: $\lambda(\mu_{ap} - \mu_B)/\phi$; triângulos: $\lambda N_1/\phi$; quadrados: $\lambda N_2/\phi$. Linha tracejada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$; linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ calibrada usando solução do MIC; linha pontilhada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ padrão, sem calibração.

de segunda ordem consistente com os resultados da simulação numérica, que supera as previsões da teoria de primeira ordem. A tabela (5.2) mostra uma comparação semelhante à realizada na tabela (5.1), para as funções

viscométricas da emulsão. Nota-se que a calibração traz os desvios relativos das funções viscométricas para os mesmo patamares daqueles calculados no caso das grandezas geométricas da gota. A boa concordância entre as predições das

Tabela 5.2: Desvios relativos entre as predições numérica, pelo Método Integral de Contorno, e pela teoria assintótica $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ calibrada, para emulsões monodispersas diluídas com $\lambda = 10$, no intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10^1]$.

Função viscométrica	Desvio relativo máximo	Desvio relativo médio
$\lambda(\mu_{ap} - \mu_B)/\phi$	3,72% ($Ca_\lambda = 10,00$)	1,25%
$\lambda N_1/\phi$	2,54% ($Ca_\lambda = 10,00$)	1,27%
$\lambda N_2/\phi$	2,24% ($Ca_\lambda = 1,63$)	0,84%

funções viscométricas da emulsão pela teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, calibrada pela simulação numérica, e pelo Método Integral de Contorno é um resultado esperado. Em termos imediatos, isso apenas expressa que a forma funcional escolhida para a equação constitutiva da emulsão e o procedimento de ajuste são adequados para o caso em que $\lambda = 10$. Deseja-se agora examinar o comportamento da emulsão para uma taxa de cisalhamento fixa em uma faixa de razões de viscosidade. Dessa forma, é possível avaliar-se, sistematicamente, a extensão da teoria obtida quanto à sua capacidade de prever o comportamento mecânico de emulsões para diferentes valores de λ .

A figura (5.15) mostra λD_1 , λD_2 e $4\theta/\phi$ como função de λ para $Ca_\lambda = 4$. A faixa de razão de viscosidades estudadas é tal que $\lambda^{-1} \in [1/100, 1/5]$, sendo que esse intervalo foi varrido por 20 pontos logaritmicamente espaçados. O valor de capilaridade escolhido está no regime em que são observadas as maiores discrepâncias entre as soluções numérica e teórica, propiciando uma configuração exigente para o estudo comparativo pretendido. Por outro lado, essa taxa de cisalhamento não é tão grande tal que as simulações para os menores valores de razão de viscosidade estejam muito próximos de uma condição de ruptura de gotas, o que pode comprometer simulações que não empregam técnicas de variação de topologia de malha. Podemos observar pelo gráfico da figura (5.15) que a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ para a forma da gota tem um comportamento típico de soluções assintóticas. Para valores de λ menores do que 10 (isto é, para $\lambda^{-1} > 0,1$) a solução assintótica começa a afastar-se da solução numérica, definindo uma possível faixa de aplicação da referida teoria. A mesma análise realizada para os resultados apresentados em (5.15), agora aplicada para a tensão induzida pela fase dispersa, revela que o procedimento

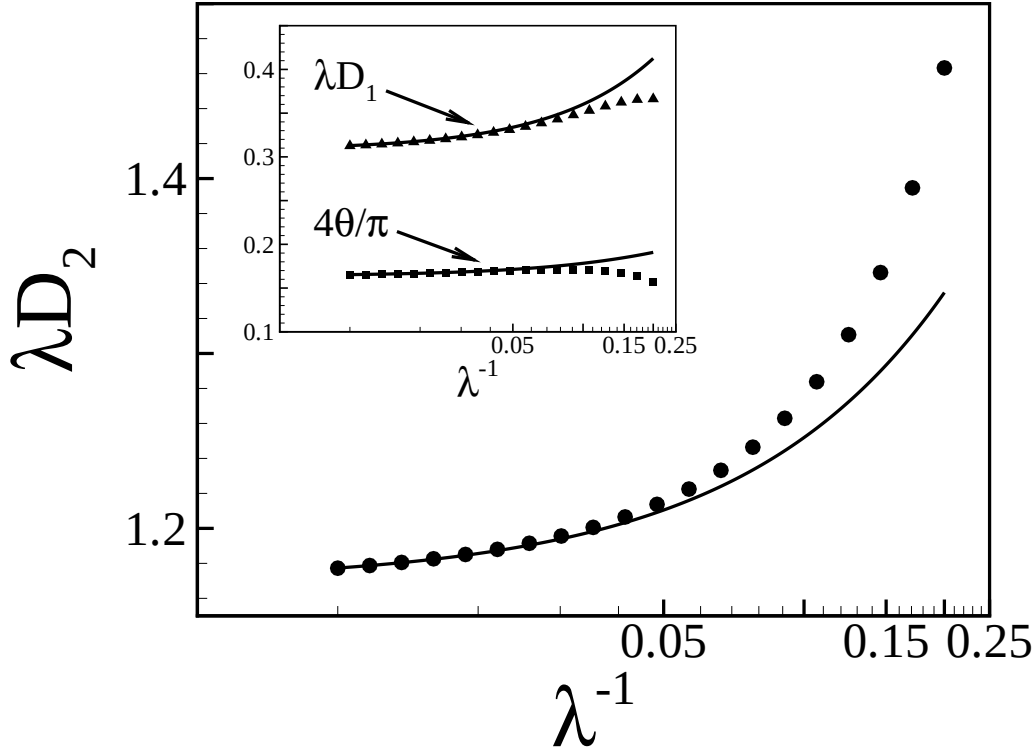


Figura 5.15: Geometria da gota como função de λ para $Ca_\lambda = 4$ em cisalhamento simples. Linha cheia: Teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$; Símbolos: resultados numéricos MIC; Círculos: λD_2 . Encarte: triângulos: λD_1 ; quadrados: $4\theta/\pi$.

de ajuste das funções materiais da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, utilizando dados numéricos do MIC obtidos para um único valor de λ , fornece uma teoria robusta. Chama a atenção no encarte do gráfico em (5.16) que as previsões para a viscosidade feitas pelo método numérico e pela teoria são praticamente coincidentes em todo intervalo de λ estudado. As previsões feitas por essa teoria são tais que os desvios em relação à referência numérica sejam sempre inferiores a 3% para $\lambda \leq 10$, em cisalhamento simples.

Espera-se que a equação do modelo constitutivo semiteórico produzido pela calibração dos coeficientes da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ também apresente bons resultados em outras situações. Para isso, investigações adicionais, em escoamentos de pura extensão e cisalhamento oscilatório serão realizadas. No entanto, mais importante ainda é o fato de que o procedimento de se propor uma equação constitutiva, baseada em teorias assintóticas, e ampliar seu espectro de aplicação pela determinação de constantes materiais utilizando bases de dados geradas numérica ou experimentalmente, gerou bons resultados para emulsões. Procedimentos semelhantes podem ser empregados em outros tipos de fluidos não-newtonianos como em soluções poliméricas.

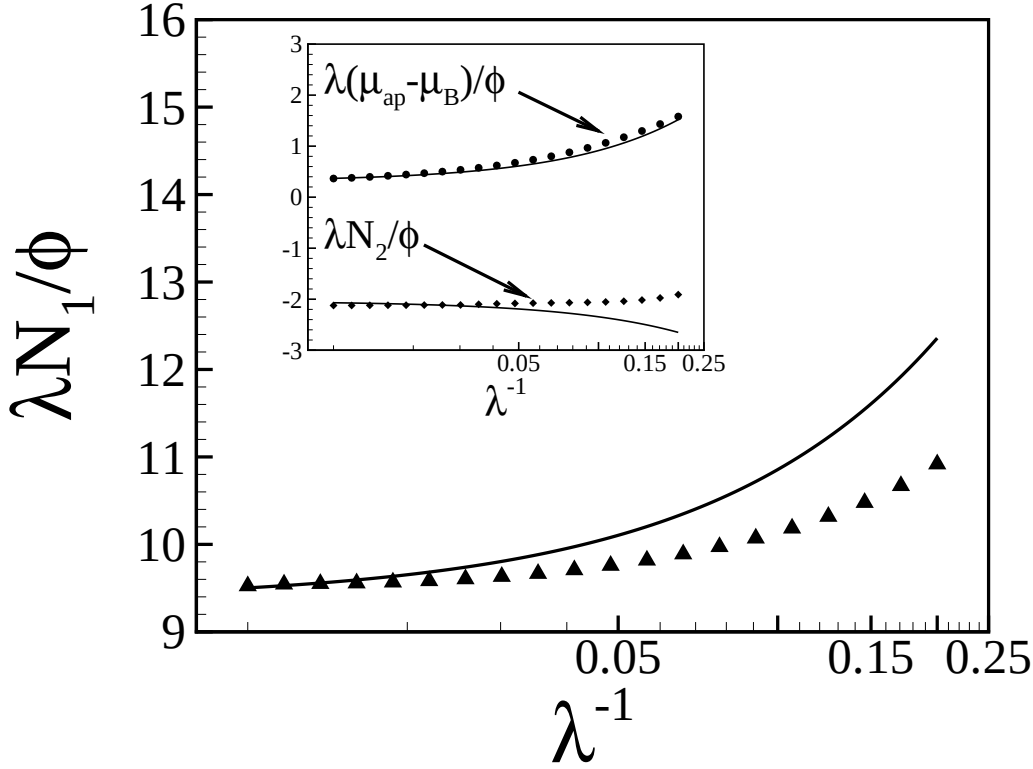


Figura 5.16: Reologia da emulsão como função de λ para $Ca_\lambda = 4$ em cisalhamento simples. Linha cheia: Teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$; Símbolos: resultados numéricos MIC; Círculos: λD_2 . Encarte: triângulos: λD_1 ; quadrados: $4\theta/\pi$.

5.3.2

Escoamento de pura extensão

Um estudo semelhante ao apresentado para cisalhamento simples também foi realizado para emulsões monodispersas, diluídas em escoamento de pura extensão. Utilizou-se um campo de velocidade tal que $\mathbf{E} = \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 - 1/2(\mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3)$. Conforme comentado anteriormente, esse tipo de escoamento é irrotacional, de maneira que o mecanismo de restauração da forma da gota devido à rotação com a vorticidade está ausente. Assim sendo, para qualquer valor de razão de viscosidade é possível encontrar uma taxa de extensão tal que a gota se rompa. Em outras palavras, independente do valor de λ , a gota deforma-se indefinidamente à medida que aumentamos o número de capilaridade. Além disso, em qualquer regime desse escoamento $D_1 = 0$ e a gota mantém-se alinhada na direção de $\mathbf{u}^\infty$. O comportamento de λD_2 como função de Ca_ε pode ser observado na figura (5.17). Aqui definiu-se o número de capilaridade como

$$Ca_\varepsilon = \frac{\lambda \mu a \dot{\varepsilon}}{\sigma}. \quad (5-3)$$

Utilizou-se $\lambda = 20$ (o dobro do que foi empregado no caso similar para

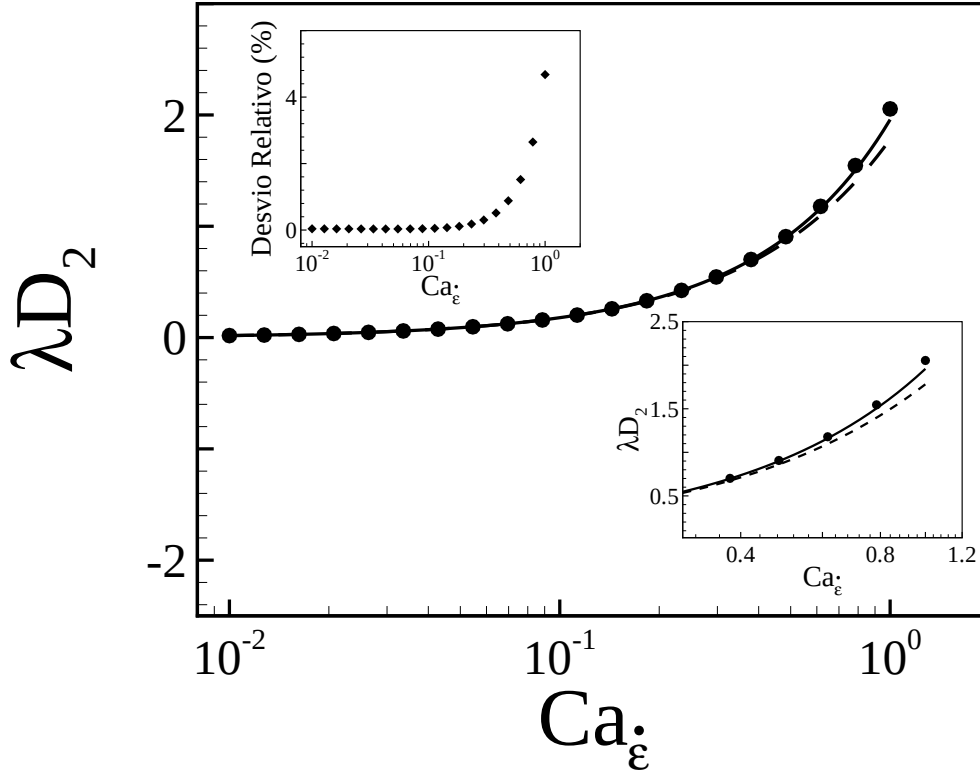


Figura 5.17: Comparação entre resultados para λD_2 obtidos pelas teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e pelo Método Integral de Contorno, em escoamento de pura extensão para $\lambda = 20$. Círculos: MIC ; linha pontilhada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$; linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$. Encarte superior: Desvio relativo entre o MIC e a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$. Encarte inferior: Detalhe do efeito da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ em relação à teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$.

cisalhamento simples) para que fosse possível explorar uma faixa de taxas de extensão mais significativa, sem que a gota atingisse uma configuração próxima a ruptura. Verificou-se que para $Ca_\varepsilon < 1/2$ a diferença relativa entre os resultados numérico e teórico é menor do que 1%. A partir daí, a resposta numérica afasta-se rapidamente da previsão teórica, atingindo um desvio relativo máximo ligeiramente menor do que 5%, para o caso estudado. Valores de número de capilaridade maiores do que a unidade requerem malhas muito refinadas ou, preferencialmente, com adaptação incorporada de uma rotina de variação de topologia². Vale ainda comentar que nos gráficos da figura (5.17) é possível ter a impressão de que a teoria de segunda ordem não avançou significativamente em relação à de primeira ordem. Porém, em termos quantitativos, para $Ca_\varepsilon = 1$ temos que a diferença entre essas duas previsões fica em torno de 10%, mesmo para $\lambda = 20$.

A reologia da emulsão também foi explorada para esse escoamento. Em

²Isto é, com adição e retirada de pontos e re-conexão de elementos.

extensão pura os modelos teóricos e numérico não acusaram a presença significativa de segunda diferença de tensões normais. Por outro lado pode-se definir uma quantidade reológica de grande interesse prático para a caracterização de fluidos não-newtonianos em escoamentos extensionais chamada viscosidade extensional, μ_e . De acordo com Bird *et.al.* (1987)

$$\mu_e = \frac{2\sigma_{11} - \sigma_{22} - \sigma_{33}}{6}. \quad (5-4)$$

Dessa forma, substituindo a expressão de $\mathbf{E}$ na equação do tensor de tensões da emulsão e considerando o modelo de pequenas deformações de segunda ordem calibrado pelos resultados do MIC, obtemos

$$\begin{aligned} \mu_e = & 1 + \phi \left[l_1^{(0)} + \frac{1}{\lambda} \left(l_1^{(1)} Ca_{\dot{\varepsilon}} - l_2^{(1)} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\lambda^2} \left(l_1^{(2)} Ca_{\dot{\varepsilon}}^2 + l_2^{(2)} Ca_{\dot{\varepsilon}} + l_3^{(2)} \right) \right], \end{aligned} \quad (5-5)$$

em que

$$\begin{aligned} l_1^{(0)} &= \frac{5}{2}, & l_1^{(1)} &= \frac{285}{112}, & l_2^{(1)} &= \frac{3}{2}, \\ l_1^{(2)} &= \frac{1087}{200}, & l_2^{(2)} &= \frac{33189}{56000}, & l_3^{(2)} &= \frac{4784561}{1120000}. \end{aligned} \quad (5-6)$$

É possível definir uma parcela newtoniana, referente à $Ca_{\dot{\varepsilon}} \rightarrow 0$, correspondente à viscosidade de Taylor para emulsões de alta razões de viscosidade em escoamento extensional pela equação (5-7).

$$\mu_{Te} = 1 + \phi \left(l_1^{(0)} - l_2^{(1)} / \lambda \right). \quad (5-7)$$

A primeira diferença de tensões normais é calculada como no caso do cisalhamento simples, ou seja, $N_1 = Ca_{\dot{\varepsilon}}(\sigma_{11} - \sigma_{22})$. Usando-se a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ é possível mostrar que

$$\begin{aligned} N_1 = & 3 Ca_{\dot{\varepsilon}} + \phi \left[m_1^{(0)} Ca_{\dot{\varepsilon}} + \frac{1}{\lambda} \left(m_1^{(1)} Ca_{\dot{\varepsilon}}^2 - m_2^{(1)} Ca_{\dot{\varepsilon}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\lambda^2} \left(m_1^{(2)} Ca_{\dot{\varepsilon}}^3 + m_2^{(2)} Ca_{\dot{\varepsilon}}^2 + m_3^{(2)} Ca_{\dot{\varepsilon}} \right) \right], \end{aligned} \quad (5-8)$$

em que

$$\begin{aligned} m_1^{(0)} &= \frac{15}{2}, & m_1^{(1)} &= \frac{855}{112}, & m_2^{(1)} &= \frac{9}{2}, \\ m_1^{(2)} &= \frac{14353683}{1120000}, & m_2^{(2)} &= \frac{99567}{56000}, & m_3^{(2)} &= \frac{3261}{200}. \end{aligned} \quad (5-9)$$

Na figura (5.18) são apresentados os resultados obtidos para a variação da viscosidade extensional e primeira diferença de tensões normais (no encarte)

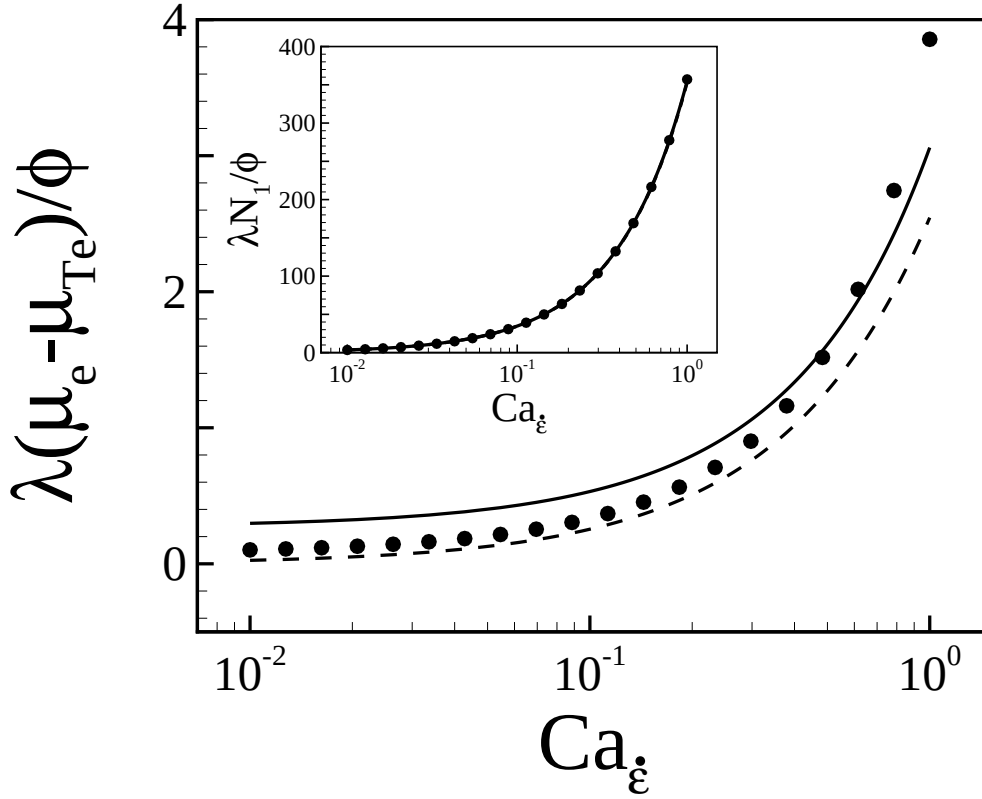


Figura 5.18: Comparação entre resultados para $\lambda\mu_e/\phi$ e $\lambda N_1/\phi$ (encarte) obtidos pelas teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e pelo Método Integral de Contorno, em escoamento de pura extensão para $\lambda = 20$. Círculos: MIC ; linha pontilhada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$; linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$.

como função do número de capilaridade extensional. Nesse caso, observa-se que a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ afasta-se da solução numérica em baixos capilaridades, em relação à teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$. Seguramente isso acontece em decorrência do procedimento de calibração que foi empregado na construção da teoria de segunda ordem para a tensão. Entretanto, nota-se que no intervalo em que as variações da viscosidade são mais pronunciadas, a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ aproxima-se da predição dada pelo MIC. Variações absolutas de mesma magnitude das observadas para μ_e também ocorreram para N_1 . Porém, como os valores dessa função viscométrica são pelo menos duas ordens de magnitude maiores do que os valores da viscosidade (mesmo sem a subtração de μ_{Te}), não podem ser observados no gráfico.

As variações de D_2 em função de λ^{-1} para $Ca_\epsilon = 1/2$ podem ser observadas no gráfico da figura (5.19). Observamos nessa figura que a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ faz predições em excelente concordância com os resultados numéricos obtidos pelo MIC para $\lambda \leq 10$. Podemos ainda inferir que para valores de λ menores do que dez a gota começa a apresentar deformações mais significativas. Nesse regime as predições das teorias afastam-se da resposta numérica, que

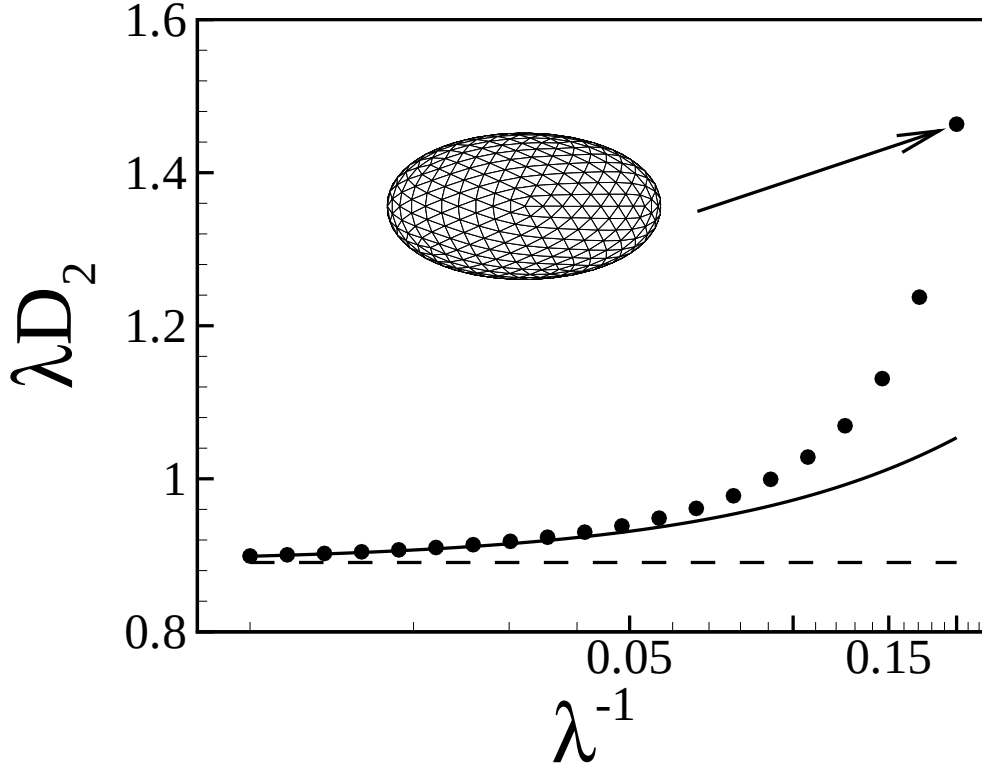


Figura 5.19: Comparação entre resultados para λD_2 obtidos pelas teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e pelo Método Integral de Contorno, em escoamento de pura extensão para $Ca_{\dot{\epsilon}} = 1/2$. Círculos: MIC ; linha pontilhada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$; linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$.

aponta para a ruptura iminente da gota. O mesmo estudo realizado agora para μ_e e N_1 revela que a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, calibrada usando resultados de uma simulação numérica, em cisalhamento simples, para $\lambda = 10$, pode prever o comportamento reológico da emulsão em pura extensão para diversos valores de razão de viscosidade. Esse fato pode ser verificado na figura (5.20), em que observa-se uma boa concordância entre a teoria de segunda ordem e os resultados numéricos para a contribuição da tensão da fase dispersa para $\lambda \approx 10$.

É relevante o fato de que, para um fluido não-newtoniano como uma emulsão, a determinação de constantes materiais utilizando o escoamento cisalhante simples possa ser utilizada em outros tipos de escoamentos. Em geral isso não acontece com fluidos não-lineares, havendo grande dependência entre o tipo de escoamento e as constantes materiais dos modelos constitutivos usados em sua descrição mecânica. A aparente universalidade das constantes $\mathcal{C}_i$ do modelo constitutivo derivado da teoria de pequenas deformações $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ decorre da condição de suspensão diluída. Nesse caso, como o distúrbio de velocidade causado pelas gotas vizinhas a uma gota qualquer da emulsão é

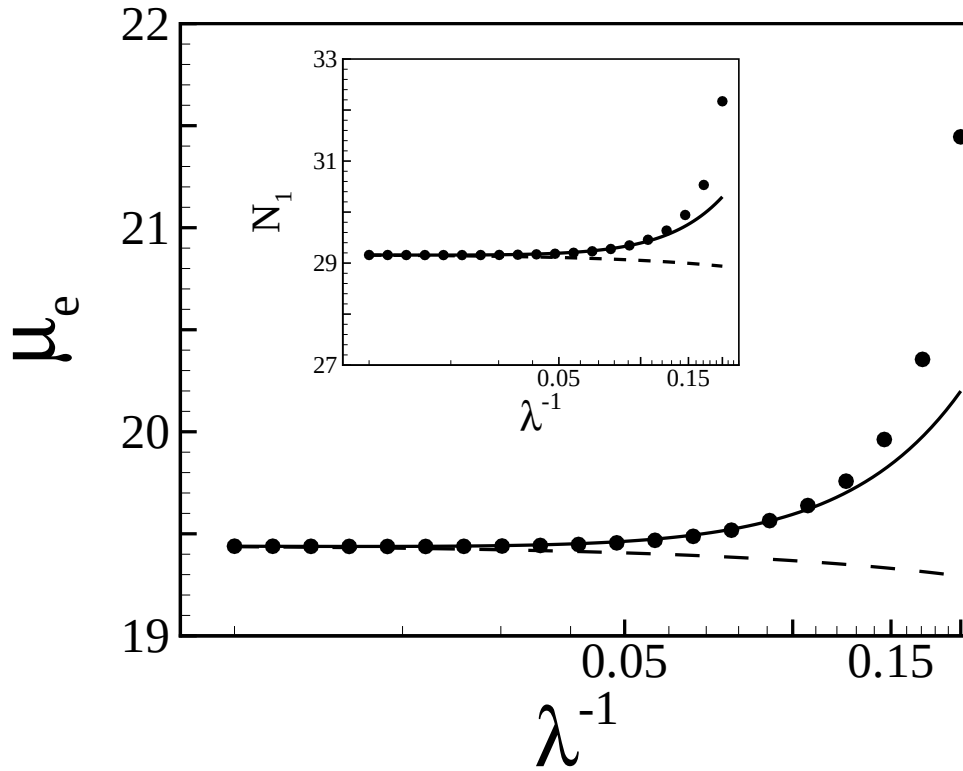


Figura 5.20: Comparação entre resultados para μ_{ap} e N_1 obtidos pelas teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e pelo Método Integral de Contorno, em escoamento de pura extensão para $Ca_{\dot{\epsilon}} = 1/2$. Círculos: MIC ; linha pontilhada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$; linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$.

muito pequeno, a estrutura da suspensão (ou seja a configuração espacial das gotas) é irrelevante para a reologia. Certamente essa universalidade não deve permanecer para emulsões concentradas, em que um maior número de mecanismos físicos como interação entre gotas, múltiplos tempos de relaxação e migração e difusão hidrodinâmica de partículas atuam na resposta material. A vantagem dessa metodologia está no fato que as teorias de pequenas deformações derivam de modelos microestruturais, na escala da gota, capazes de prever os principais mecanismos físicos que governam esses escoamentos. Por isso, os harmônicos esféricos de alta ordem das equações (4-137) e (4-143) são protótipos de equações constitutivas privilegiados em relações à modelos derivados simplesmente de análises contínuas essencialmente heurísticas. Nesses casos, o fluido é tratado como um meio homogêneo em todas as etapas da construção da equação constitutiva, não havendo o suporte físico proveniente de análises microestruturais do material.

5.4

Regimes não-lineares de escoamento

Nessa seção será estudado o comportamento de emulsões diluídas em regimes de escoamentos, predominantemente, não-lineares. Serão explorados principalmente os efeitos não-lineares associados à razões de viscosidade próximas da unidade, em que as deformações das gotas são mais significativas se comparadas com as previstas pela teoria de pequenas deformações. Os dois tipos de escoamentos explorados são o escoamento através de tubos e o escoamento cisalhante oscilatório.

5.4.1

Escoamento de emulsões através de tubos

O estudo do escoamento de emulsões através de tubos foi realizado nesse trabalho utilizando-se a metodologia descrita na seção 4.5.4. O objetivo aqui é verificar o comportamento da viscosidade aparente como função do número de capilaridade para emulsões tais que $\lambda \sim 1$. Com esse fim, uma tabela relacionando o valor de cada componente do tensor de tensões oriundo da fase dispersa, σ^d , como função do número de capilaridade em cisalhamento simples deve ser gerada. No entanto, em um contexto prático, em que essa tarefa será realizada por um programa baseado no Método Integral de Contorno, há restrições de tempo de computação que desencorajam a realização de tabelas muito amplas no intervalo de Ca_λ e densas em relação ao número de pontos. No presente caso, arbitrou-se uma configuração de simulação em que foram simulados 100 casos cobrindo um intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10^1]$, com pontos logaritmicamente distribuídos. Com a finalidade de verificar a importância do refinamento e da faixa de aplicação da tabela, foi realizada a comparação mostrada na figura (5.21). Nesse estudo foram empregadas duas tabelas com intervalos de definição e refinamentos diferentes, geradas nas mesmas condições de concentração e razão de viscosidade. Para a geração das tabelas utilizou-se a teoria assintótica de segunda ordem. A tabela *a* cobre o intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-3}, 10^3]$ com 100.000 pontos. A tabela *b* cobre o intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10^1]$ com 100 pontos, tal qual a tabela gerada pelo Método Integral de Contorno. Verifica-se na figura (5.21), sobretudo no encarte, que os desvios entre as respostas são muito pequenos, ficando em todos os casos em patamares inferiores a 0,01%. Nos limites do intervalo simulado esses desvios são maiores porque valores de tensão para capilaridades fora da tabela são tomados como iguais aos dos pontos limites da tabela. Ou seja, considerando

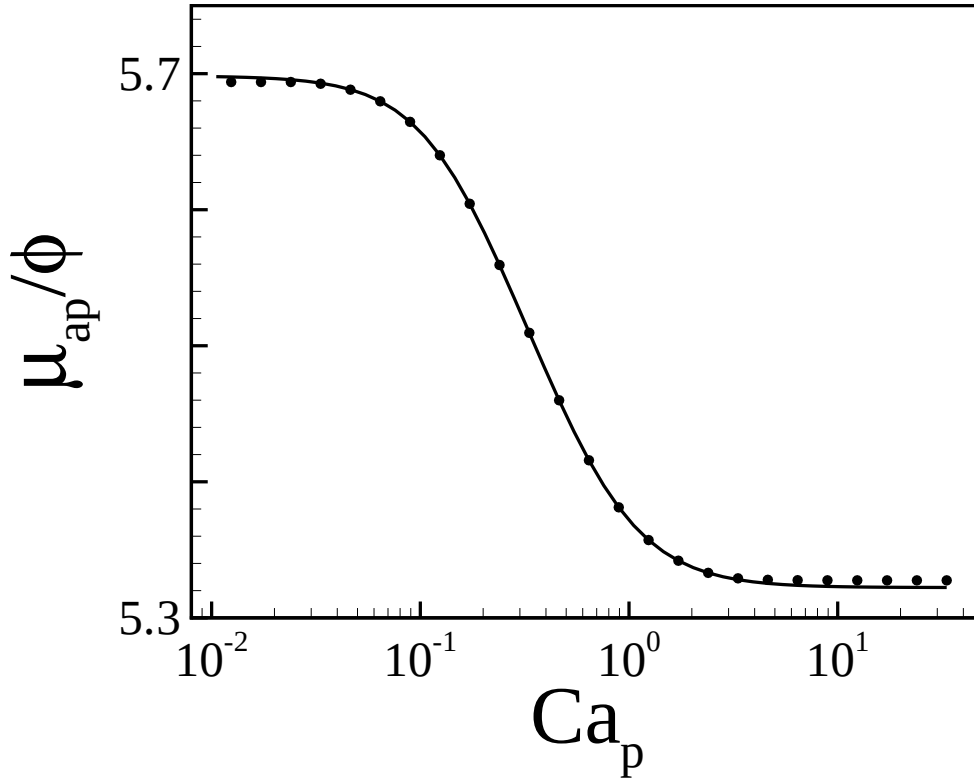


Figura 5.21: Viscosidade aparente em função do número de capilaridade utilizando tabelamentos da tensão em diferentes condições. Linha cheia: $Ca_\lambda \in [10^{-3}, 10^3]$ logaritmicamente distribuídos em 1000 pontos. Pontos: $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10^1]$ logaritmicamente distribuídos em 100 pontos. Encarte: desvio relativo.

a tabela b , se a tensão para $Ca_p = 20$ é necessária, então utiliza-se a tensão correspondente em $Ca_p = 10$. Essa aproximação pode ser melhorada no limite de baixos números de capilaridade utilizando-se a teoria assintótica discutida na seção 4.2. Para altas taxas de cisalhamento, é preciso que a tabela seja construída de forma que o platô newtoniano desse limite seja plenamente atingido. Na região central do intervalo de Ca_p simulado o desvio entre as soluções sendo mínimo, permite concluir que o refinamento da tabela foi suficiente. No presente caso, com base nos desvios encontrados, consideramos tanto a amplitude como o refinamento da tabela satisfatórios.

As duas tabelas utilizadas nas simulações de escoamento de Poiseuille³ de emulsões diluídas foram geradas utilizando-se simulações com o Método Integral de Contorno, para $\phi = 30\%$. Realizou-se simulações com $\lambda = 10$ e $\lambda = 4$. Foram geradas malhas com 1280 elementos triangulares em ambos os casos. Nessas simulações o procedimento de extrapolação para prever o valor das propriedades em uma malha de infinitos elementos, desenvolvido na seção

³Ver nota de rodapé na página 128.

5.1, não foi empregado. No entanto, considerando os valores de razão de viscosidade do presente estudo e que para baixos valores de λ a influência do refinamento da malha é menor (conforme discutido na seção mencionada), o referido procedimento não é relevante neste contexto. Inicialmente pretendia-

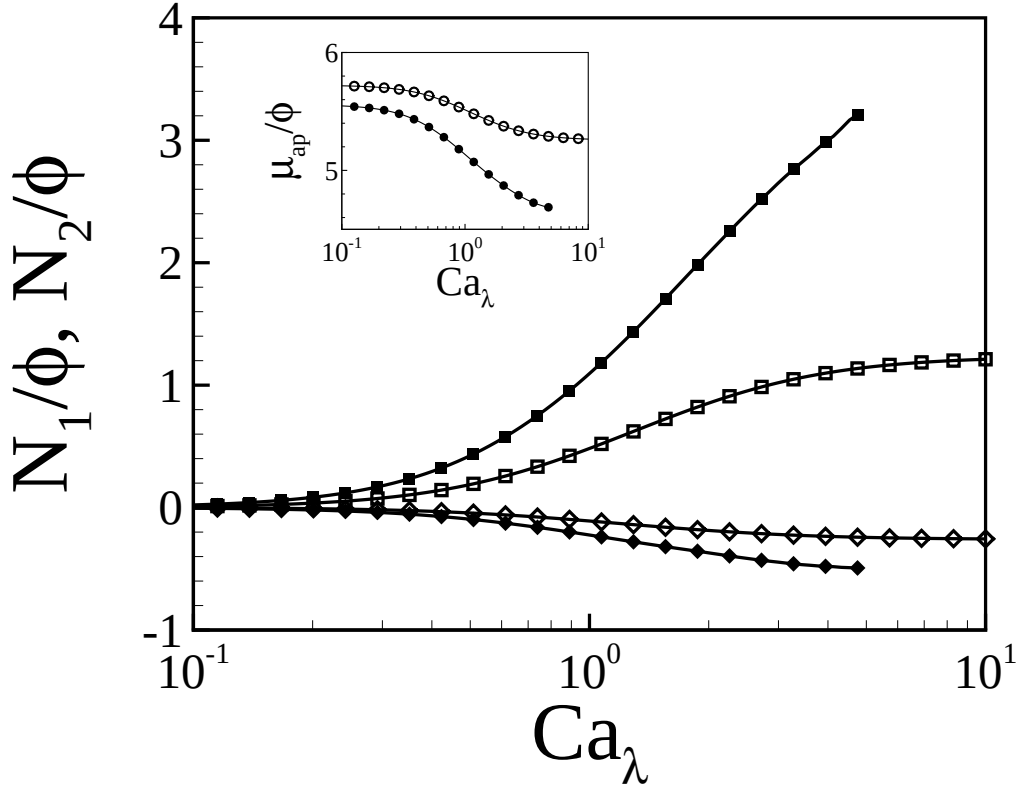


Figura 5.22: Tabelas de tensão utilizadas na simulação do escoamento de emulsões através de tubos. Linhas com símbolos cheios: $\lambda = 4$, linhas com símbolos vazados: $\lambda = 10$. Quadrados: N_1/ϕ , losangos: N_2/ϕ , círculos: μ_{ap}/ϕ (encarte).

se cobrir, em ambos os casos, o intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10^1]$. No entanto, para a menor razão de viscosidade, por volta de $Ca_\lambda = 5$, a deformação da gota era tal que o procedimento de adaptação empregado não era capaz de produzir uma malha adequada à simulação dos níveis de deformação requeridos no problema. Eventualmente, se as condições impostas sobre as partículas levam a gota à configurações críticas, próximas da ruptura existe a necessidade de um procedimento de malha adaptativa mais robusto, com topologia variável. Podemos observar na figura (5.22) o comportamento das grandezas viscométricas como função do número de capilaridade. Observamos que a importância dos efeitos não-lineares no caso $\lambda = 4$ é maior em comparação ao caso de $\lambda = 10$, como já esperávamos. Vale notar o comportamento de N_1 que chega a ser três vezes maior para $\lambda = 4$ em relação a $\lambda = 10$, resultado este diretamente associado coma maior anisotropia da gota que tende a se orientar ao longo das linhas de

corrente do escoamento. No encarte da figura (5.22) mostra-se também que o efeito pseudo-plástico da emulsão é muito mais pronunciado no caso de $\lambda = 4$, devido a condição de gota mais deformada.

Utilizado os resultados das simulações mencionadas no parágrafo anterior, foram realizadas simulações do escoamento de emulsões em cisalhamento quadrático. Nesse caso, apenas o valor da componente σ_{12} ⁴ é necessária. Observamos que a viscosidade aparente no escoamento de Poiseuille acom-

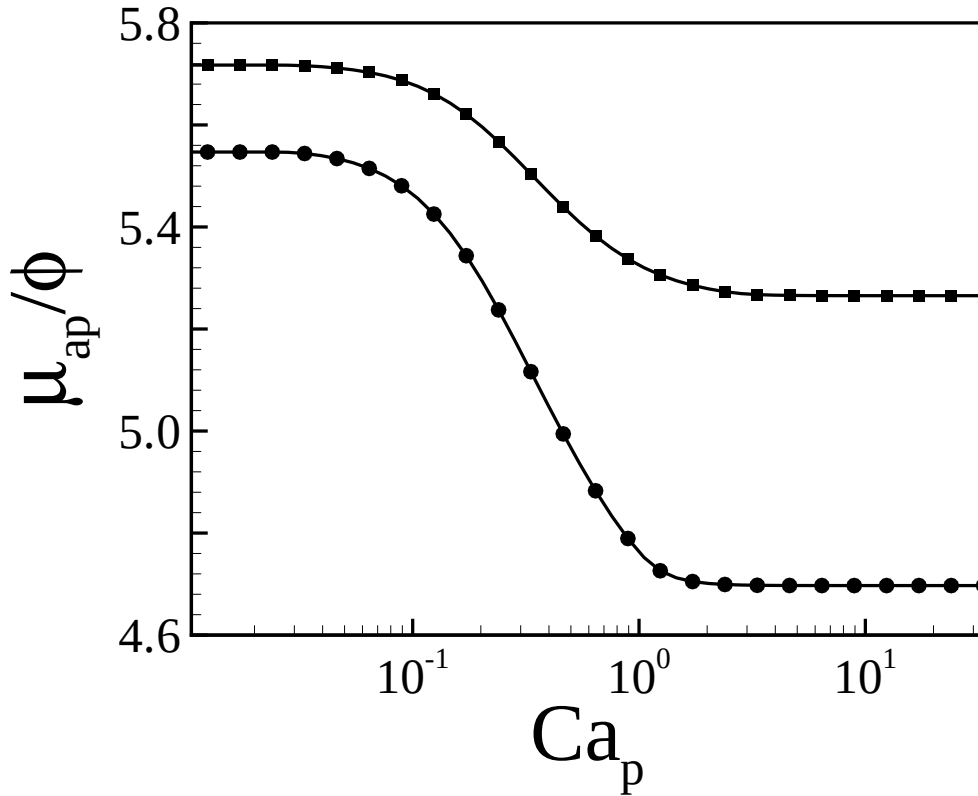


Figura 5.23: Viscosidade aparente do escoamento de emulsões diluídas através de tubos. Quadrados: $\lambda = 10$, círculos: $\lambda = 4$.

panha qualitativamente os resultados da simulação em cisalhamento simples. Além da viscosidade ser menor em valores absolutos, a diferença entre os valores nos platôs newtonianos para $\lambda = 4$ é cerca de 2 vezes maior em relação ao caso de $\lambda = 10$. Esse resultado é efeito das maiores deformações das gotas de menor viscosidade. Vale comentar que para $\lambda = 4$ as gotas estão sujeitas à ruptura, segundo o trabalho de Barthès-Biesel & Acrivos (1973). Dessa forma, a configuração escolhida para essa simulação deve estar próxima da condição limítrofe em que um estudo considerando emulsões topologicamente estáveis, ou seja, emulsões com número de gota constante, pode ser realizado.

⁴Em termos adimensionais μ_{ap} , segundo a notação do gráfico da figura (5.22).

5.4.2

Cisalhamento oscilatório

Nesta seção são explorados resultados de simulações numéricas de emulsões em cisalhamento oscilatório, nos moldes que foram empregados na seção 4.4. Inicialmente são feitas comparações entre resultados da teoria de pequenas deformações e os obtidos pelas simulações numéricas (MIC) para as séries temporais das funções viscométricas. Aqui novamente é utilizado o procedimento de extrapolação para prever o valor das propriedades em uma malha de infinitos elementos, com malhas de 720 e 980 elementos, respectivamente. Os resultados para uma simulação em uma condição de alta razão de viscosidade podem ser observados nas figuras (5.24) e (5.25). Na primeira podemos ver a evolução temporal da viscosidade aparente da emulsão e na segunda a evolução temporal das diferenças de tensões normais, a partir da condição inicial. Observa-se uma boa concordância entre os resultados numérico e da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, inclusive na predição dos transientes iniciais e nos picos de máxima amplitude das séries temporais.

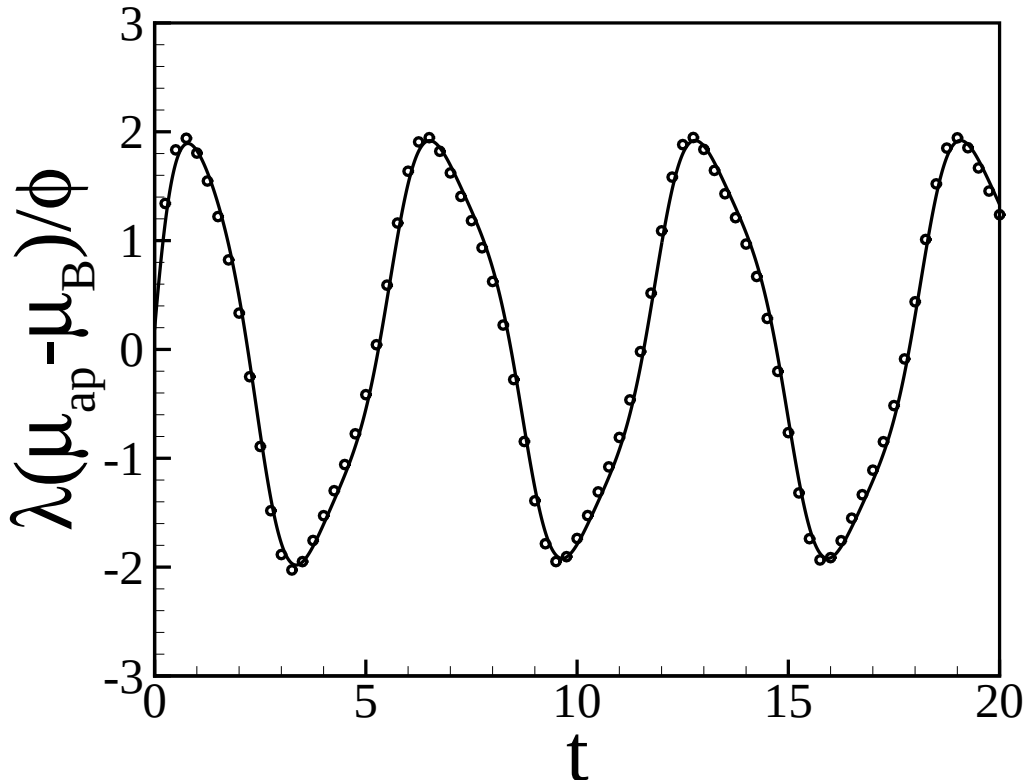


Figura 5.24: Viscosidade de uma emulsão diluída de alta razão de viscosidade em função do tempo em cisalhamento oscilatório. Linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, círculos: MIC. Condições da simulação: $\phi = 30\%$, $\lambda = 20$, $Ca_\lambda = 2$, $\omega_o = 1$ e $\gamma_o = 2$.

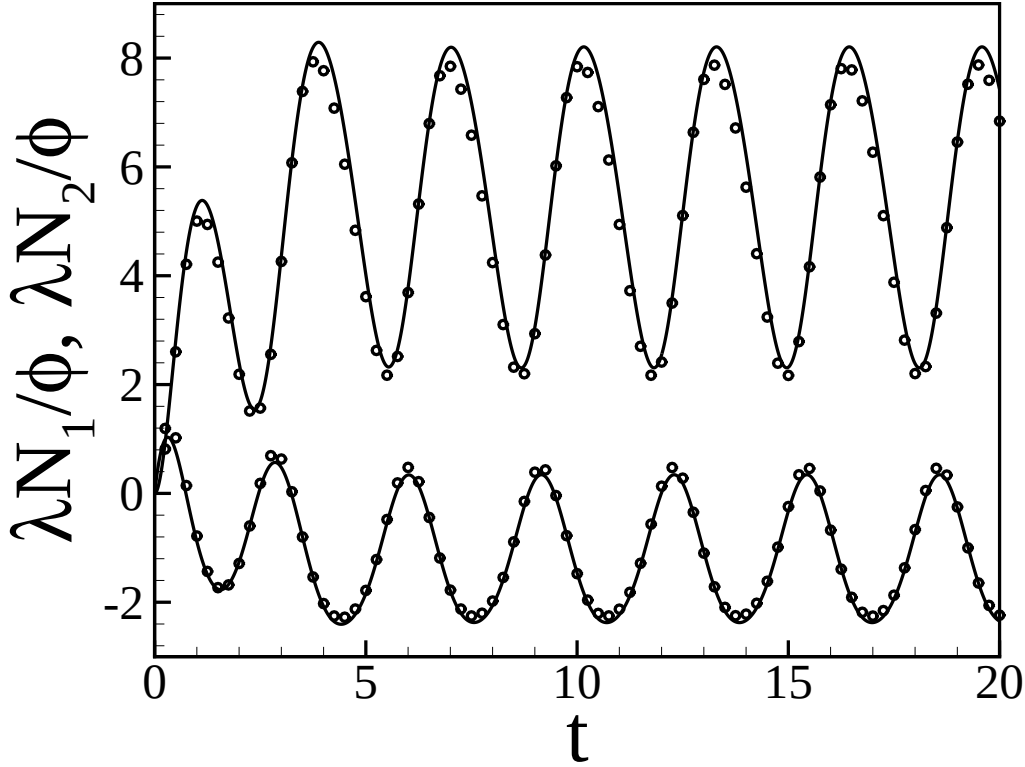


Figura 5.25: Diferenças de tensões normais de uma emulsão diluída de alta razão de viscosidade em função do tempo em cisalhamento oscilatório. Linha cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, círculos: MIC. Condições da simulação: $\phi = 30\%$, $\lambda = 20$, $Ca_\lambda = 2$, $\omega_o = 1$ e $\gamma_o = 2$.

Deseja-se verificar a influência da razão de viscosidade no comportamento da emulsão. Dessa forma, simulações com $\lambda = 20, 5$ e 2 foram realizadas. Uma comparação das respostas temporais de cada simulação pode ser vista nas figuras (5.26), (5.27) e (5.28). No caso da viscosidade, observa-se uma grande diferença nas amplitudes das respostas entre os três casos. Vale comentar que apenas a parcela não-linear dessa grandeza é apresentada, para evidenciar os efeitos não-newtonianos. O mesmo não acontece com a primeira diferença de tensões normais, mostrada na figura (5.27). Nesse caso, comparando-se os sinais de N_1 para os casos de $\lambda = 5$ e $\lambda = 2$, observamos que a amplitude não varia na mesma proporção de $(\mu_{ap} - \mu_B)$. Em contrapartida, há uma variação perceptível no seu valor médio. Olhando agora para as séries temporais de N_2 observamos uma combinação desses efeitos, tal que há simultaneamente variações significativas de amplitude e também da média do sinal. De certa forma, esse comportamento pode ser previsto pela teoria de pequenas deformações $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$, desenvolvida na seção 4.4, complementada pelo apêndice C. Observando as equações de (C-1) e (C-6) desse apêndice podemos inferir que a composição das amplitudes das respostas de N_2 são combinações

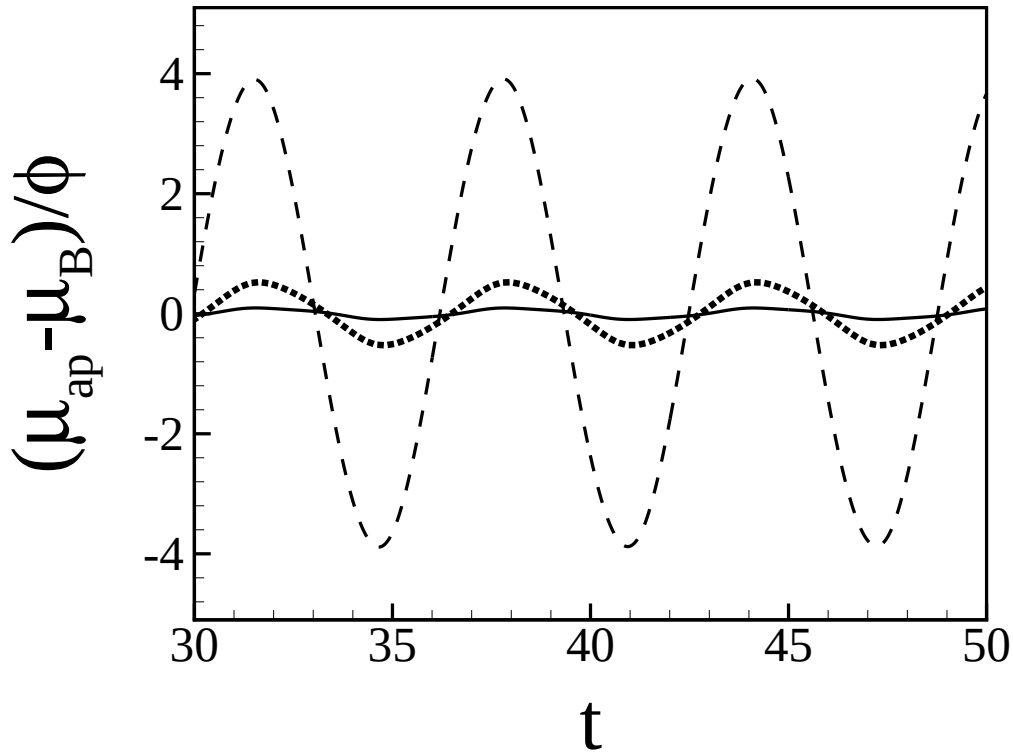


Figura 5.26: Viscosidade em função do tempo para uma emulsão diluída. Linha cheia: $\lambda = 20$, linha pontilhada: $\lambda = 5$, linha tracejada: $\lambda = 2$. Condições da simulação: $Ca_\lambda = 2$, $\omega_o = 1$ e $\gamma_o = 2$.

lineares dos coeficientes a_i e b_i das amplitudes de resposta de μ_{ap} e N_1 .

Observando os resultados em frequência de N_2 para $\lambda = 2$, podemos notar uma variação da altura dos picos da resposta. Isso indica que para razões de viscosidade da ordem da unidade a resposta do sinal desmembra-se em mais modos de oscilação em comparação aos demais sinais. Observando cuidadosamente, o mesmo ocorre na resposta de N_1 . Para melhor inferir esse efeito não-linear relacionado ao escoamento de emulsões de razões de viscosidade⁵ mais baixas, uma análise dos espectros da resposta em frequência das funções viscométricas é apropriada. Para isso, mais uma vez utilizou-se uma rotina de *FFT* da biblioteca *IMSLF90*, (IMSL, Inc., 1997), observando sempre a necessidade de se sincronizar a captura do fragmento de sinal que deve ser analisado com múltiplos inteiros do período de excitação. Os resultados dessa análise podem ser vistos nas figuras (5.29) e (5.30). Nelas são mostrados os espectros das respostas, em fase com a deformação, de N_1 e N_2 , respectivamente obtidos. Observa-se das simulações numéricas usando o Método Integral de Contorno que em ambos os casos que a resposta da emulsão de $\lambda = 2$ apresenta um espectro muito mais complexo, com amplitudes significativas em vários modos

⁵Entenda-se nesse contexto, razões de viscosidade da ordem da unidade.

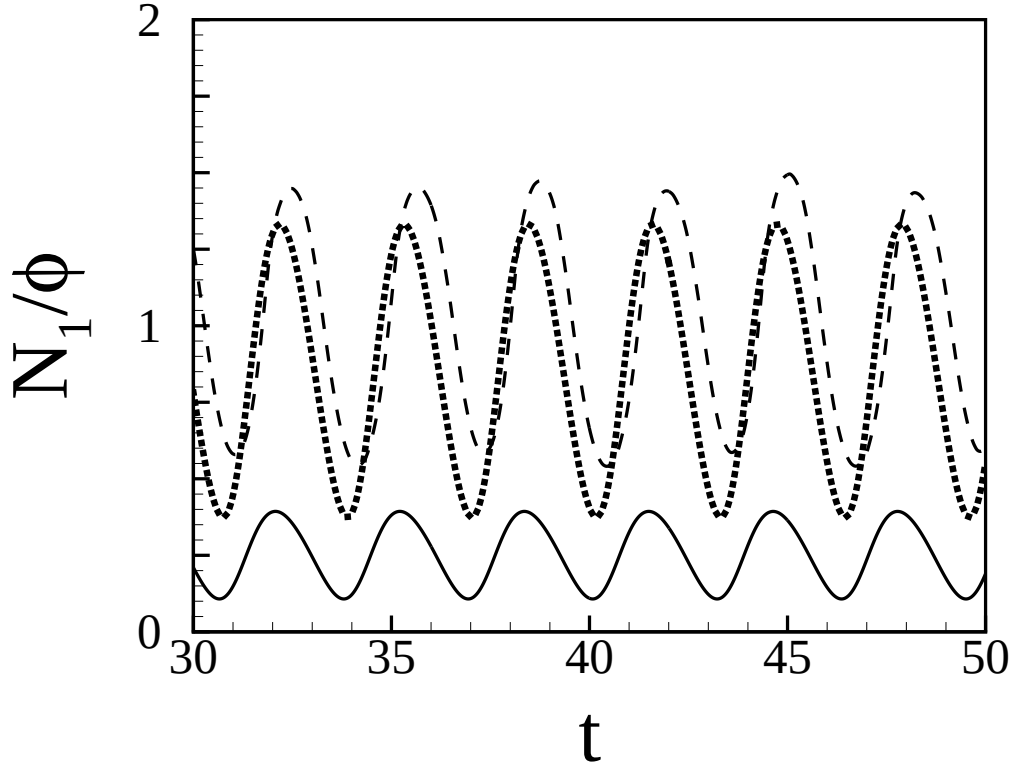


Figura 5.27: Primeira diferença de tensões normais em função do tempo para uma emulsão diluída. Linha cheia: $\lambda = 20$, linha pontilhada: $\lambda = 5$, linha tracejada: $\lambda = 2$. Condições da simulação: $\phi = 30\%$, $Ca_\lambda = 2$, $\omega_o = 1$ e $\gamma_o = 2$.

de oscilação diferentes. Comportamento semelhante é observado nas respostas em fase com a taxa de deformação, não havendo necessidade de expô-los aqui. Sendo assim, é possível concluir que à medida que diminuimos o valor da razão de viscosidade, não só a amplitude das respostas das funções viscométricas não-lineares aumentam, mas também há o surgimento de modos de oscilação diferentes dos encontrados em altas razões de viscosidade.

A exemplo dos estudos realizados por meio das teorias assintóticas, o comportamento das funções viscométricas η'_i e χ'_{ii} como função da amplitude de taxa cisalhamento foi analisado. No entanto, dessa vez para três valores de razão de viscosidade distintos. Na figura (5.31) observamos que para $\lambda = 20$ a teoria de segunda ordem e a previsão numérica são coincidentes. Mesmo para $\lambda = 5$ as previsões teórica e numérica são muito próximas, mantendo um aspecto qualitativo similar. Na simulação do caso $\lambda = 2$, o ponto correspondente a $\gamma_o = 10$ (ou seja, $Ca_\lambda = 10$, para $\omega_o = 1$) por limitações da topologia da malha. Essa situação é, provavelmente, uma condição de ruptura.

No caso da amplitude da resposta de N_1 em fase com a taxa de deformação, apresentada na figura (5.32), observamos um comportamento

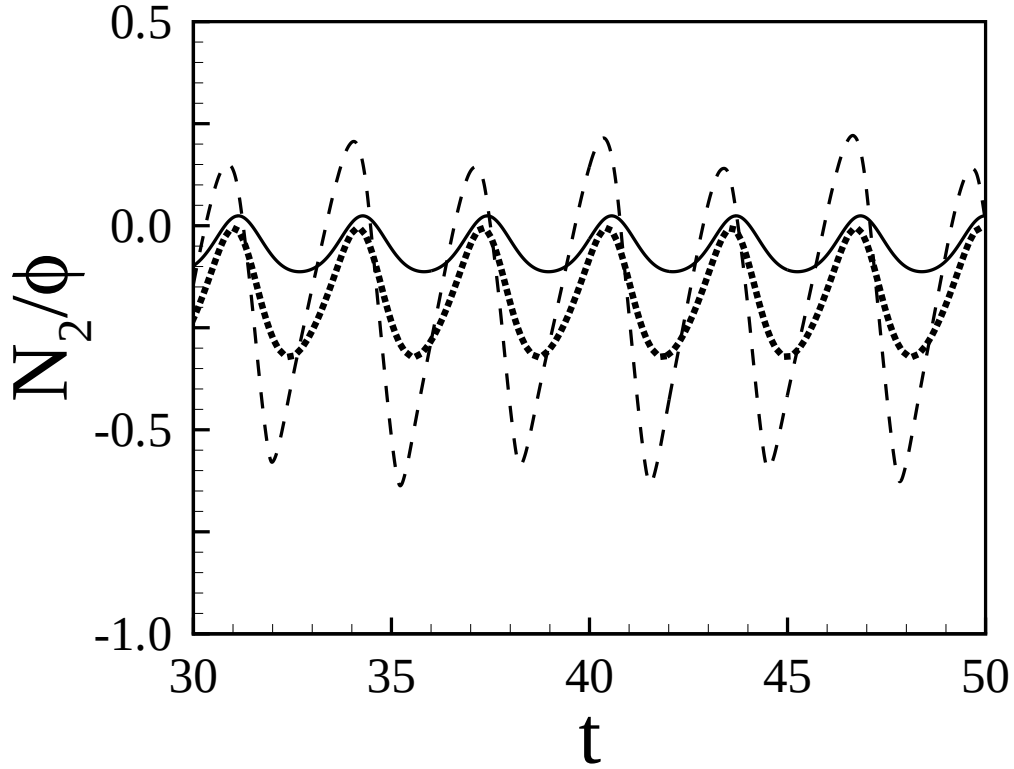


Figura 5.28: Segunda diferença de tensões normais em função do tempo para uma emulsão diluída. Linha cheia: $\lambda = 20$, linha pontilhada: $\lambda = 5$, linha tracejada: $\lambda = 2$. Condições da simulação: $\phi = 30\%$, $Ca_\lambda = 2$, $\omega_o = 1$ e $\gamma_o = 2$.

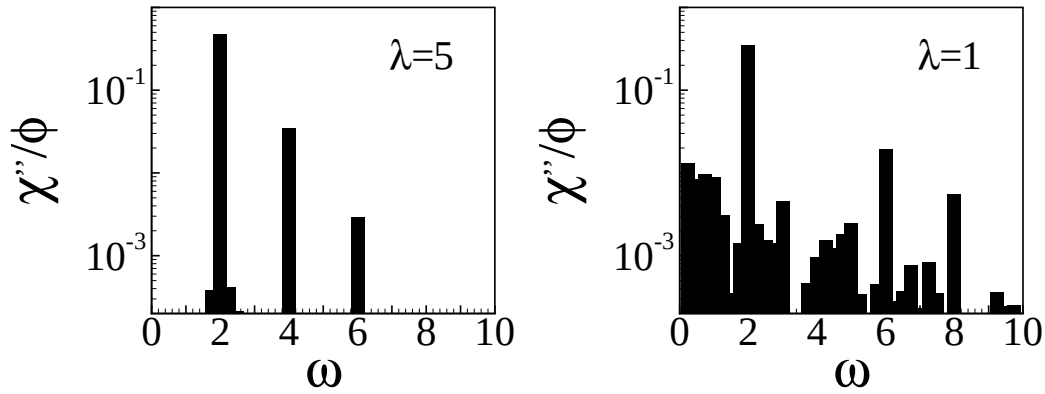


Figura 5.29: Espectro da resposta de N_1 ao cisalhamento oscilatório, em fase com a deformação, para emulsões diluídas. Condições da simulação: $Ca_\lambda = 2$, $\omega_o = 1$ e $\gamma_o = 2$.

significativamente mais complexo do que o caso anterior, sobretudo para altas amplitudes de taxa de cisalhamento. Ainda assim, os resultados da teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ para $\lambda = 20$ e $\lambda = 5$ são satisfatórios, prevendo de forma qualitativa o comportamento de χ'_{ii} como função de γ_o . Nota-se no gráfico que há uma troca do sinal de χ'_{ii} à medida que se diminui o valor da razão de viscosidade, se

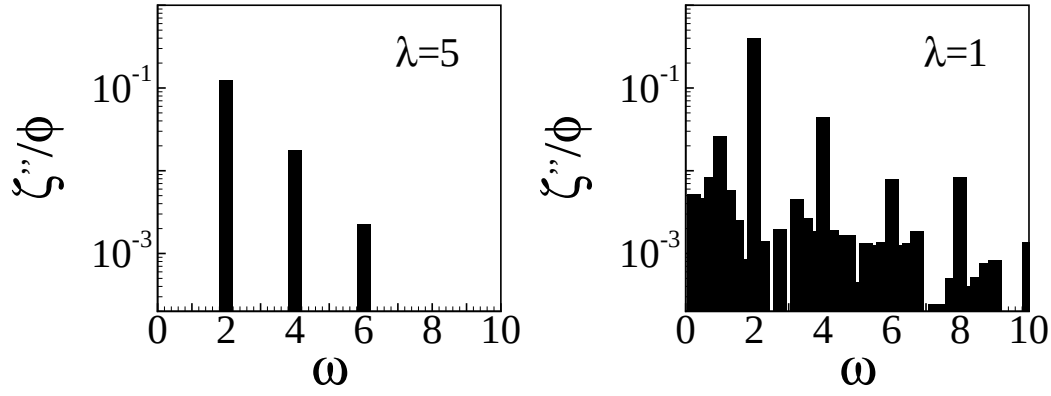


Figura 5.30: Espectro da resposta de N_2 ao cisalhamento oscilatório, em fase com a deformação, para emulsões diluídas. Condições da simulação: $Ca_\lambda = 2$, $\omega_o = 1$ e $\gamma_o = 2$.

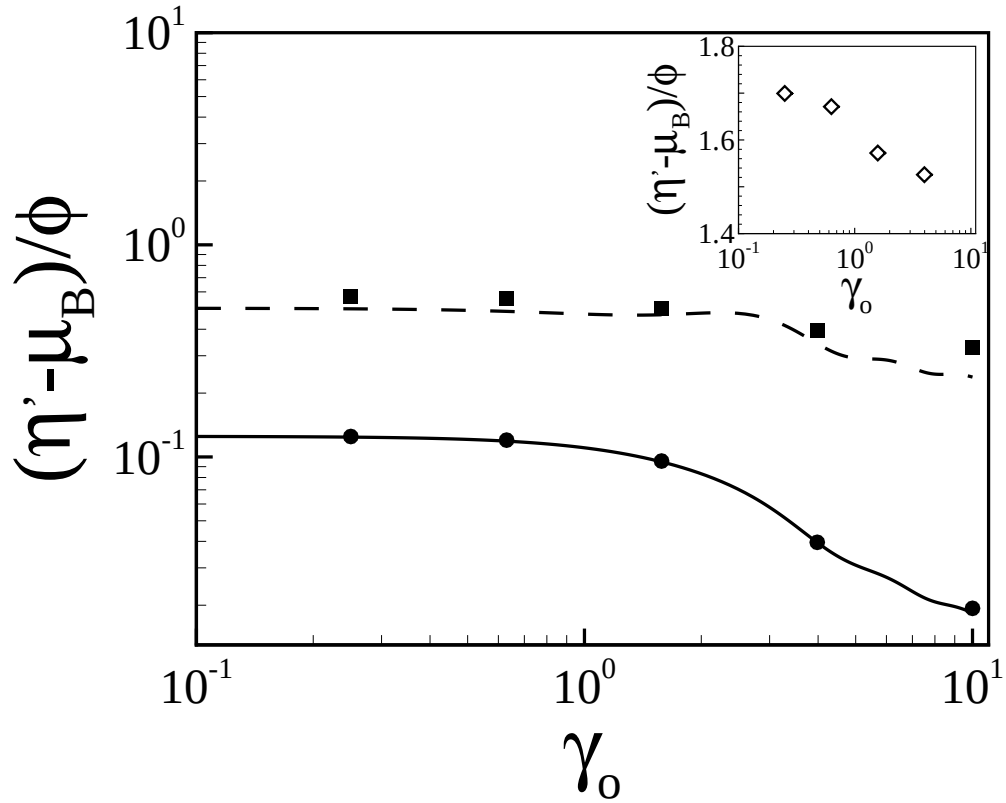


Figura 5.31: Módulo viscoso da emulsão como função da amplitude de taxa de cisalhamento. $\omega_o = 1$. Linhas cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e $\lambda = 20$, linha tracejada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ para $\lambda = 5$, círculos cheios: MIC e $\lambda = 20$, quadrados cheios: MIC e $\lambda = 5$, losangos vazados: MIC e $\lambda = 2$.

fixarmos o valor de γ_o . Esse comportamento também é antecipado pela teoria de pequenas deformações como pode ser apreciado no gráfico.

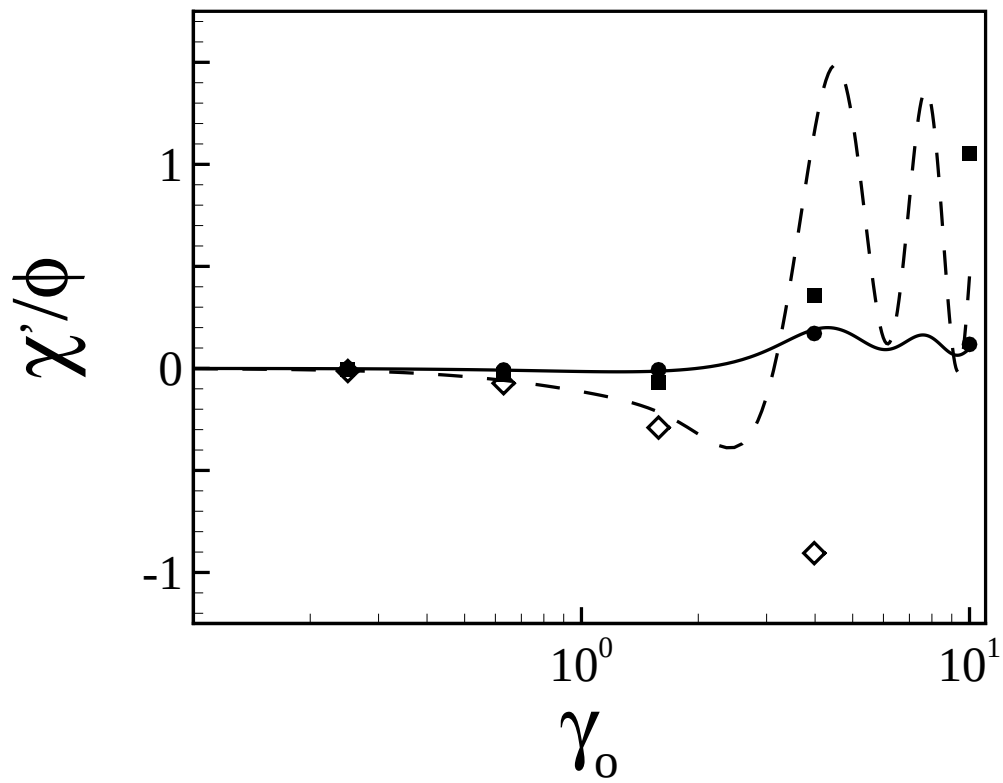


Figura 5.32: Amplitude da resposta de N_1 em fase com a taxa de deformação, na segunda harmônica, como função da amplitude de taxa de cisalhamento. $\omega_o = 1$. Linhas cheia: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ e $\lambda = 20$, linha tracejada: teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$ para $\lambda = 5$, círculos cheios: MIC e $\lambda = 20$, quadrados cheios: MIC e $\lambda = 5$, losangos vazados: MIC e $\lambda = 2$.