

2

Modelagem Teórica de Líquidos Microestruturados.

2.1

Introdução

Uma abrangente classe de materiais, como soluções poliméricas, materiais fundidos, suspensões, cristais líquidos, usados nas indústrias química, de alimentos, biomédica e muitas outras são materiais microestruturados (Pasquali, 2000 [52]).

Estes tipos de fluidos não obedecem uma simples relação linear entre a tensão e a taxa de deformação e por isso são classificados de forma geral como fluidos não Newtonianos. O comportamento desses fluidos é complexo e não segue um determinado padrão.

Por exemplo a maioria das soluções poliméricas e dos materiais fundidos apresentam comportamento pseudoplástico, ou seja a viscosidade cai com a taxa de deformação, ao passo que as suspensões concentradas de pequenas partículas sólidas freqüentemente apresentam um comportamento dilatante. No entanto líquidos com microestruturas semelhantes têm um comportamento similar em escoamentos reométricos e há evidências de que esta similaridade pode ser estendida para escoamentos em processos complexos.

Especificamente, as características microestruturais dominantes de um material polimérico fundido são o comprimento da cadeia polimérica e seu grau de rigidez (Curtiss, 1996 [41]). Estas por sua vez controlam seu grau de emaranhamento, isto é, a influência que cada cadeia tem sobre o movimento das outras. Nas soluções poliméricas, além do comprimento e da rigidez da cadeia, são importantes a concentração e qualidade de solvente.

Os métodos atuais para introduzir a microestrutura na descrição do comportamento mecânico do material (sólido e líquido) podem ser agrupados em duas grandes categorias: a teoria microscópica e a teoria mesoscópica. As duas abordagens diferem principalmente no nível de detalhe usado para descrever a microestrutura do material.

A teoria microscópica se caracteriza pela representação da cadeia polimérica por um conjunto de elementos micromecânicos. Um exemplo clássico de um elemento micromecânico é o de duas massas conectadas por um haste ou por uma mola.

Nos polímeros fundidos o material é modelado como um grande número desses elementos que interagem entre si. No caso de soluções poliméricas diluídas ou semi-diluídas os elementos micromecânicos não interagem entre eles mas com o meio solvente. Na Fig. 2.1 pode-se observar um esquema ilustrativo do grau de detalhe com o que as diferentes teorias explicam o comportamento mecânico do material microestruturado.

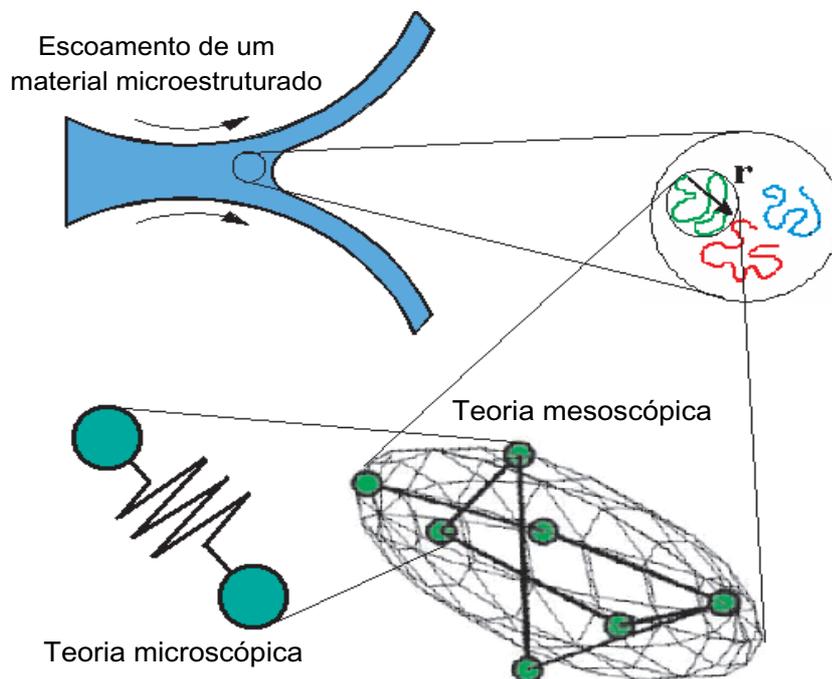


Figura 2.1: Modelagem do comportamento mecânico dos líquidos microestruturados.

Se as macromoléculas que fazem parte da microestrutura do líquido são dissolvidas num solvente de baixo peso molecular, como no caso das soluções poliméricas, o efeito das colisões das moléculas do solvente com os elementos microestruturais é modelado por uma expressão estocástica. Esta da origem a uma equação diferencial de segunda ordem que é chamada de *equação de difusão*, pois descreve como um conjunto de pontos se *difundem* num espaço configuracional multidimensional apropriado para o modelo molecular.

A equação de difusão é obtida combinando a equação de movimento para cada massa do sistema massa-mola com uma equação de continuidade que descreve a conservação de um sistema de pontos num espaço configuracional (Bird et al, 1987 [24]).

A equação de movimento para cada massa do sistema massa-mola considera basicamente três forças, (Bird et al, 1987 [24]):

- A força de arrasto viscosa que é a resistência experimentada pelo sistema massa-mola devido ao escoamento através da solução, cuja ação tende a orientar e esticar as moléculas poliméricas;
- A força Browniana gerada devido às flutuações da velocidade do líquido o que tende a variar a orientação das moléculas aleatoriamente;
- A força intramolecular que é a força resultante numa massa devido à ação da mola do sistema, que tende a restituir à molécula ao seu tamanho original ou de equilíbrio.

A teoria microscópica é muito fiel ao fenômeno físico, pois representa as características microestruturais de um material por meio de uma grande quantidade de variáveis, que obedecem um conjunto de equações diferenciais estocásticas, devido a isto o custo computacional é elevado. Além disto, existe uma grande dificuldade para resolver as equações de transporte macroscópicas acopladas com as equações de evolução da microestrutura, o que torna a aplicação de esta abordagem proibitiva nos dias de hoje para escoamentos complexos.

Já as teorias mesoscópicas, são baseadas na introdução de variáveis de campo que representam valores médios locais das propriedades microestruturais, tais como os valores médios da deformação e rotação das moléculas numa solução polimérica diluída. Por essa razão a teoria mesoscópica descreve a física com menor fidelidade do que a teoria microscópica, porém o faz a um menor custo computacional.

Resolver escoamentos com as equações de transporte advindas desta abordagem é, portanto, comparável com o de resolver o mesmo problema com a abordagem clássica das equações de fenômenos de transporte baseadas no equilíbrio local termodinâmico linear irreversível, tais como a lei de Newton da viscosidade, a lei de Fourier de condução de calor ou a lei de Fick de difusão de massa.

A principal desvantagem da abordagem mesoscópica é que não há um caminho geral para formular as equações de transporte das variáveis que descrevem a microestrutura do material. Pasquali (2000) [52] cita algumas teorias desenvolvidas para formular estas equações de transporte.

Essas teorias proporcionam apenas a estrutura geral das equações de transporte e um conjunto de relações e desigualdades que restringem as funções que aparecem nestas equações. Portanto algumas hipóteses constitutivas são ainda requeridas para especificar completamente o comportamento do material.

2.2

Aplicação da teoria mesoscópica às soluções poliméricas.

O presente trabalho é restrito a líquidos não emaranhados, isto é, soluções com baixa concentração que podem ser consideradas soluções poliméricas diluídas ou semi-diluídas.

O líquido polimérico é considerado incompressível e isotérmico. As equações de conservação de massa e quantidade de movimento linear na ausência de forças de corpo e campos eletromagnéticos são:

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2-1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (2-2)$$

onde ρ é a densidade, ∇ é o operador gradiente no espaço físico, \mathbf{v} é o vetor velocidade, \mathbf{T} é o tensor de Cauchy e por último a derivada com respeito ao tempo é tomada com respeito a um sistema de referência inercial, mantendo a posição de um volume de controle infinitesimal fixo com respeito a dito sistema.

Assume-se que o líquido polimérico está em equilíbrio visto por um observador numa escala de tempo muito menor do que o tempo de relaxação característica da macromolécula. Por esta razão a equação fundamental tem que ser capaz de explicar processos moleculares não relaxados relevantes.

A característica microestrutural mais importante do escoamento de uma solução polimérica diluída é a conformação das cadeias poliméricas, isto é, a ação combinada do seu estiramento e orientação.

O estiramento junto com a orientação das moléculas poliméricas pode ser modelado por um tensor de segunda ordem chamado tensor conformação \mathbf{M} .

Na teoria molecular de líquidos poliméricos, a caracterização do líquido é definida pela função distribuição $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t)$. Nesta função \mathbf{x} é a posição no espaço, t é o tempo e \mathbf{r} é o vetor que liga os extremos de uma cadeia polimérica.

Portanto $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{x}$ representa o número de segmentos por unidade de massa de líquido cujo vetor-distância entre os extremos está entre \mathbf{r} e $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ e cujo centro de massa esta entre \mathbf{x} e $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$.

As funções termodinâmicas do elemento material localizado na posição \mathbf{x} , no tempo t podem ser calculados a partir da função distribuição $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t)$. Neste caso o tensor conformação pode ser definido em termos da função distribuição $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t)$ como:

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{r} \in R^3} d\mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t) \mathbf{r} \mathbf{r} \quad (2-3)$$

A informação proporcionada pelo tensor conformação não é a mesma que a proporcionada pela função distribuição, desta forma as teorias que se baseiam no tensor conformação \mathbf{M} não são tão detalhadas quanto as que se baseiam em na função distribuição $\Psi(\mathbf{r})$.

Por outro lado, o número de graus de liberdade associados a um elemento material é reduzido de quase o infinito, no caso de função distribuição, a seis componentes escalares independentes do tensor conformação, que é simétrico e positivo definido.

Embora o tensor conformação \mathbf{M} seja definido em termos da função distribuição Ψ , para descrever como a microestrutura evolui no tempo e espaço e como esta interage com outras variáveis mecânicas e termodinâmicas, é necessário introduzir uma nova equação de transporte para o tensor conformação \mathbf{M} que será resolvida acoplada às equações de conservação de massa e quantidade de movimento.

2.3

A equação de transporte para o tensor conformação para soluções poliméricas diluídas.

A equação de transporte do tensor conformação deve levar em consideração, tanto os efeitos da deformação microscópica local do material, quanto a sua relaxação interna.

Pode-se considerar que uma molécula polimérica esta formada por um conjunto de elementos lineares (sistemas massa-mola) e o tensor conformação traz a informação dos valores médios locais do comportamento mecânico dos sistemas massa-mola que formam a molécula polimérica.

A conformação molecular média por unidade de massa \mathbf{M} altera-se se a distância entre os extremos da molécula polimérica representada pelo segmento \mathbf{r} muda, isso pode acontecer devido em primeiro lugar ao efeito do gradiente de deformação macroscópica sob o estiramento de um elemento linear, em segundo lugar à rotação do elemento linear com respeito aos elementos lineares vizinhos e à rotação coletiva dos elementos lineares que formam a molécula polimérica como corpo rígido; e em terceiro lugar devido à relaxação das molécula polimérica, que tendem a recuperar a mais provável distância entre os extremos, devido à elasticidade entrópica.

A equação de transporte para o tensor conformação pode ser escrita como segue:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} = & \underbrace{2\xi \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M}}_{\substack{\text{geração de conformação} \\ \text{devido ao estiramento}}} \\
 & + \underbrace{\zeta (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2 \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M})}_{\substack{\text{geração de conformação} \\ \text{devido à orientação}}} \\
 & + \underbrace{\mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M}}_{\substack{\text{rotação como} \\ \text{corpo rígido}}} \\
 & - \frac{1}{\lambda} \underbrace{(g_0 \mathbf{I} + g_1 \mathbf{M} + g_2 \mathbf{M}^2)}_{\text{relaxação molecular}} \quad (2-4)
 \end{aligned}$$

Os três primeiros termos da direita da equação anterior representam respectivamente o estiramento ao longo dos eixos principais do tensor conformação, a rotação dos eixos principais do tensor conformação, também chamado orientação das moléculas, e por último a rotação como corpo rígido do elemento material, ou taxa de rotação coletiva das moléculas poliméricas.

Os polímeros tem extensibilidade finita, por essa razão a contribuição do estiramento para seu incremento de deformação instantânea, deve diminuir com sua extensão. Devido a isto, é introduzido no primeiro termo, o parâmetro $\xi(\mathbf{M})$ que é função do tensor conformação e que representa a resistência da molécula ao estiramento; o valor deste parâmetro pode variar entre 0 e 1, sendo que um valor igual a zero representa uma total resistência ao estiramento (moléculas rígidas).

Da mesma forma a molécula polimérica não é isotrópica e cada um dos elementos lineares que a compõem, podem ter uma rotação relativa a uma velocidade angular media diferente da vorticidade W , a diferença entre esta velocidade angular media e a vorticidade pode estar relacionada ao conceito de uma "parte vinculada à deformação" da vorticidade.

A resistência das moléculas à rotação é levada em conta pelo parâmetro $\zeta(\mathbf{M})$. O valor deste parâmetro pode variar entre 0 e 1, sendo que um valor igual a zero representa uma total resistência à rotação relativa dos segmentos.

A forma anterior inclui todos os mais populares modelos de variação de conformação induzida pelo escoamento, tal como o modelo de deformação solidária $\xi = \zeta = 1$.

O último termo da equação representa a taxa de variação do tensor conformação devido à elasticidade entrópica e ao movimento Browniano, ambas influências não podem ser separadas explicitamente, como no caso anterior,

mas representa a possibilidade da molécula relaxar em uma direção preferencial, ao longo de direções particulares devido a presença de moléculas orientadas adjacentes.

Este termo não depende do gradiente de velocidade, g_0 , g_1 e g_2 são funções adimensionais do tensor conformação e λ é o tempo de relaxação.

A função g_1 é freqüentemente relacionada à extensibilidade finita das moléculas poliméricas, como no caso do modelo FENE-P.

A função g_2 é algumas vezes associada com a idéia de que a molécula polimérica numa solução concentrada ou em materiais fundidos, relaxa mais rápido ao longo da direção de orientação principal das moléculas adjacentes, porém, uma forma geral de separar os efeitos da extensibilidade finita e da relaxação anisotrópica ainda não foi proposta.

Uma característica interessante da equação de transporte do tensor conformação é que esta pode prever a contração das moléculas na direção neutra em escoamentos bidimensionais.

Esta propriedade da equação de transporte do tensor conformação pode ser importante se a estabilidade tridimensional de um escoamento bidimensional é investigado, como é desejado na análise de escoamentos de revestimento de soluções poliméricas.

O Tensor das tensões \mathbf{T} é determinado como parte do modelo constitutivo mas as expressões para esta variável podem ser divididas em três componentes:

$$\mathbf{T} = -\pi\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\tau} \quad (2-5)$$

onde π é a pressão termodinâmica e $\boldsymbol{\sigma}$ é a componente isotrópica, $\boldsymbol{\sigma}$ é a componente elástica e $\boldsymbol{\tau}$ é a componente viscosa.

A tensão viscosa obedece a lei de Newton da viscosidade,

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\mathbf{D} = \mu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T) \quad (2-6)$$

Já que a maioria das teorias moleculares desenvolvidas para descrever o comportamento dos líquidos poliméricos vinculam a tensão elástica $\boldsymbol{\sigma}$ ao segundo momento da função distribuição $\Psi(\mathbf{r})$, é então razoável que uma simples variável tensorial junto com um escalar descreva adequadamente o estado interno do líquido escoando.

A equação fundamental da termodinâmica que relaciona todas as variáveis extensivas é a equação de Gibbs, mas com todas as hipóteses feitas anteriormente, é muito mais conveniente o uso da energia livre de Helmholtz, $a \equiv u - Ts$ do que a energia interna para descrever esta relação porque a densidade é constante. Desprezando-se a formação de emaranhados, temos

$$a = a(T, \mathbf{M}) . \quad (2-7)$$

Usando a equação da taxa de energia livre de Helmholtz e a desigualdade de Clausius-Duhem ou segunda lei da termodinâmica, a equação de transporte do tensor conformação e o postulado que a taxa de produção de entropia é uma função par da taxa de deformação \mathbf{D} (Pasquali, 2000 [52]), chega-se a seguinte relação entre a tensão elástica e as variáveis de estado microestruturais, que mostra que a tensão elástica é devido ao estiramento e à orientação das moléculas induzidas pela taxa de deformação \mathbf{D} :

$$\underbrace{\boldsymbol{\sigma}}_{\substack{\text{tensão} \\ \text{elástica}}} = \underbrace{2\rho\xi \frac{\mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} : \frac{\partial a}{\partial \mathbf{M}}}_{\substack{\text{tensão elástica devida} \\ \text{ao estiramento molecular}}} + \underbrace{2\rho\zeta \left(-\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} : \frac{\partial a}{\partial \mathbf{M}} + \mathbf{M} \cdot \frac{\partial a}{\partial \mathbf{M}} \right)}_{\substack{\text{tensão elástica devida a orientação} \\ \text{molecular}}} \quad (2-8)$$

2.4

Modelos do efeito do escoamento na Conformação polimérica

A resposta de dois diferentes modelos do comportamento polimérico é investigada no presente trabalho, sendo esses modelos casos particulares da teoria geral baseada no tensor conformação.

Esses modelos do comportamento polimérico podem ser grosseiras aproximações de como as cadeias poliméricas se comportam, porém eles capturam, ao menos qualitativamente, algumas características essenciais do comportamento de cadeias poliméricas de diferentes tipos num escoamento.

A forma geral da equação de transporte do tensor conformação para soluções sem emaranhados em regime permanente é:

$$\begin{aligned} 0 = & \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} - 2\xi(\mathbf{M}) \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} \\ & - \zeta(\mathbf{M}) (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2 \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M}) \\ & - \mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M} \\ & + \frac{1}{\lambda} (g_0(\mathbf{M}) \mathbf{I} + g_1(\mathbf{M}) \mathbf{M} + g_2(\mathbf{M}) \mathbf{M}^2) . \end{aligned} \quad (2-9)$$

onde $\xi(\mathbf{M})$ é a resistência ao alongamento, $\zeta(\mathbf{M})$ é a resistência à orientação e $g_0(\mathbf{M})$, $g_1(\mathbf{M})$ e $g_2(\mathbf{M})$ são funções de relaxação específicas.

Deformação Solidária, Extensibilidade Molecular Infinita.

As principais hipóteses consideradas neste modelo são:

- As moléculas seguem as deformações de grandes escalas impostas solidariamente : $\xi \equiv \zeta \equiv 1$;
- A taxa de relaxação das moléculas é uma função linear da distância adimensional do tensor conformação \mathbf{M} desde seu valor de equilíbrio \mathbf{I} : $g_0 \equiv -1, g_1 \equiv 1, g_2 \equiv 0$.

com essas hipóteses, a equação de transporte para o tensor conformação adimensional é

$$0 = \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} - (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M}) - \mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M} + \frac{1}{\lambda}(\mathbf{M} - \mathbf{I}) . \tag{2-10}$$

Esta equação pode produzir o modelo Upper Convected Maxwell Pasquali (2000) [52], se a energia livre do líquido depende linearmente do traço do tensor conformação e não existe tensão viscosa ou pode produzir o modelo Oldroyd-B, se o tensor das tensões tem tanto parte elástica quanto viscosa.

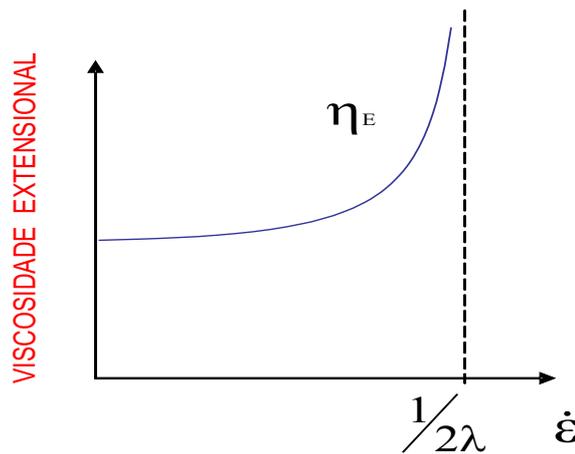


Figura 2.2: Viscosidade extensiva como função da taxa de extensão para o modelo Oldroyd-B.

A taxa do volume ocupado pelas moléculas no escoamento em relação ao volume ocupado pelas mesmas moléculas no equilíbrio é representado como a

raiz quadrada do determinante do tensor conformação. Neste modelo, essa taxa pode variar pela ação do gradiente de velocidade.

Uma molécula infinitamente flexível é descrita pela equação anterior, isto é, não interessa quão esticada a molécula esteja é possível esticá-la ainda mais na presença de rápidas deformações. E a taxa na qual as moléculas relaxam cresce linearmente com o seu grau de distorção (ou seja são linearmente elásticas).

A resposta do modelo Oldroyd-B quando submetido a escoamentos simples de extensão (η_e viscosidade extensional uniaxial) é crescente com a taxa de extensão é que chega a ser infinita para taxas de extensão finitas, (valores acima de $1/2\lambda$) como é mostrado na fig. 2.2. Já a viscosidade de cisalhamento é constante.

As hipóteses de deformações solidárias e extensibilidade infinita (Gaussiana) dos segmentos descrevem bem o comportamento perto do equilíbrio de moléculas poliméricas longas, flexíveis e lineares, mas representam pobremente o comportamento das moléculas fortemente esticadas.

Deformação Solidária, Extensibilidade Molecular Finita (FENE-P).

As hipóteses do modelo FENE-P são:

- As moléculas seguem as deformações de grandes escalas impostas solidariamente : $\xi \equiv \zeta \equiv 1$;
- A máxima extensão das moléculas é finita, e sua taxa de relaxação cresce infinitamente rápido tanto quanto a extensão molecular média cresce e se aproxima ao seu valor máximo \mathbf{I} : $g_0 \equiv -1$, $g_1 \equiv (b - 1)/(b - \text{tr}\mathbf{M}/3)$, $g_2 \equiv 0$. O parâmetro b controla a extensão molecular, e é definido como a razão do máximo comprimento da molécula polimérica ao quadrado com respeito ao comprimento médio da molécula em equilíbrio ao quadrado. A equação de transporte para o tensor de conformação adimensional fica:

$$0 = \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} - (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M}) - \mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M} + \frac{1}{\lambda} \left[\left(\frac{b-1}{b - \frac{\text{tr}\mathbf{M}}{3}} \right) \mathbf{M} - \mathbf{I} \right] \quad (2-11)$$

Esta equação é muito conveniente porque a função de relaxação é reduzida a 1 quando $\mathbf{M} \approx \mathbf{I}$, expressão que recupera o modelo de Maxwell, λ é o tempo de relaxação viscoelástico linear.

O termo de relaxação não linear no modelo FENE-P limita a máxima extensão atingida pelas moléculas e isso é uma importante melhora comparado

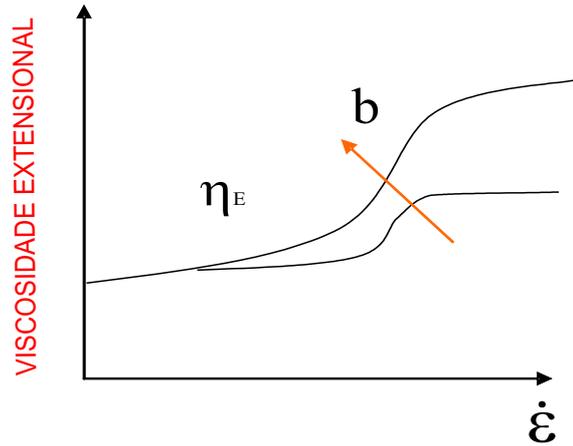


Figura 2.3: Viscosidade extensional como função da taxa de extensão para o modelo FENE-P.

com os modelos anteriores. Assim como no modelo de Maxwell o volume ocupado pelas moléculas pode mudar pela ação do escoamento.

A viscosidade de cisalhamento apresentada pelo modelo FENE-P é também constante

A função relaxação do modelo FENE-P prediz que num escoamento bidimensional a contração das moléculas poliméricas será na direção neutra do escoamento.

| Constitutive model | ξ | ζ | g_0 | g_1 | g_2 | a |
|--------------------|-------|---------|-------|---------------------------------|-------|---|
| Maxwell/Oldroyd-B | 1 | 1 | -1 | 1 | 0 | $\frac{G}{2\rho} I_M$ |
| FENE-P | 1 | 1 | -1 | $\frac{b-1}{b - \frac{I_M}{3}}$ | 0 | $\frac{-3G}{2\rho} (b-1) \ln \frac{b - \frac{I_M}{3}}{b-1}$ |

Tabela 2.1: Parâmetros e funções de relaxação dos modelos constitutivos Maxwell/Oldroyd-B (Larson, 1988 [26]) e FENE-P (Bird et al., 1987 [24]). I_M é o primeiro invariante do tensor conformação \mathbf{M} e G é módulo de elasticidade polimérica.

2.5

Estimativa de estabilidade do escoamento bidimensional.

A estabilidade do escoamento bidimensional em regime permanente no processo de revestimento por rotação direta, pode ser estimada através de critérios simples baseados no equilíbrio de forças nas proximidades da superfície livre.

Como discutido anteriormente, Pitts (1961) [5] desenvolveu um critério simples baseado no balanço de forças na direção transversal ao escoamento. Em sua análise, as forças viscosas e elásticas foram desprezadas e apenas a pressão foi considerada no balanço de forças.

O escoamento é considerado instável se a pressão sob a protuberância da superfície livre perturbada, ponto 1, for menor do que a pressão sob a posição inicial da interface, ponto 2, conforme mostrado na Fig. 1.4. As pressões nesses pontos podem ser calculadas através da curvatura do menisco e do gradiente de pressão na interface:

$$p_1 = -\frac{1}{Ca} \frac{1}{r(x)} \quad \text{and} \quad p_2 = -\frac{1}{Ca} \left(\frac{1}{r(x+\epsilon)} + \epsilon N^2 \right) - \frac{dp}{dx} \epsilon$$

$Ca \equiv \mu V / \sigma$ é o número de capilaridade; $1/r$ é a curvatura do menisco no plano $x - y$; N é o número de onda da perturbação transversal; e ϵ é a amplitude infinitesimal da perturbação. O critério de estabilidade resultante desta análise simplificada é dado por:

$$\frac{dp}{dx} < \frac{1}{Ca} \left(\frac{1}{r^2} \frac{dr}{dx} + N^2 \right) \quad (2-12)$$

onde r é o raio de curvatura do menisco.

Recentemente, Graham (2003) [57] propôs um outro critério simples para estimar a estabilidade de escoamentos com superfícies livres em relação à perturbações na direção transversal ao escoamento. Os argumentos são baseado no balanço de quantidade de movimento na direção principal do escoamento.

A hipótese central de sua análise é que se a tensão total (incluindo a contribuição viscosa e elástica) na direção do escoamento sob a protuberância da interface perturbada for maior do que sob a posição original da superfície livre, a perturbação irá ser puxada para fora da interface crescerá. Neste caso o escoamento é instável.

Uma importante contribuição apresentada na análise de Graham (2003) [57] é a introdução de um sistema de coordenadas cilíndrico pontual na interface, o que permitiu a incorporação de tensões de "hoop" no balanço de forças na

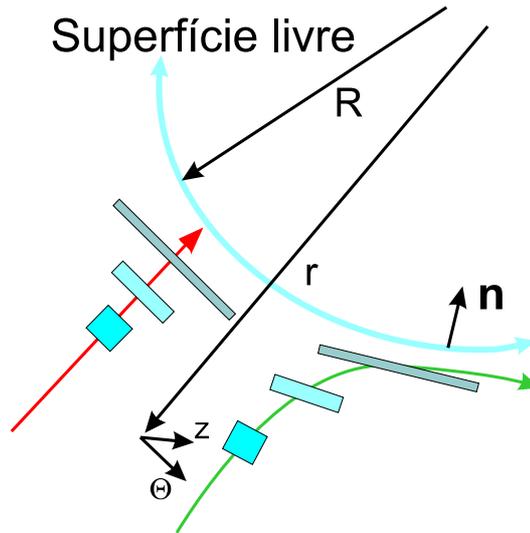


Figura 2.4: Sistema de coordenadas cilíndricas usada por Graham(2003) perto da superfície livre.

superfície livre através da componente azimutal do tensor das tensões escrito no sistema de coordenadas cilíndrico local. O escoamento é estável quando

$$-\rho g_r < \frac{\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{rr}}{R} + \sigma N^2. \quad (2-13)$$

O mecanismo de desestabilização está relacionado com a combinação de altas tensões tangenciais e curvatura ao longo da superfície livre côncava. A análise de Graham (2003) [57] despreza o termo relacionado com a variação da curvatura na direção azimutal da superfície livre com a posição da interface, isto é o termo $\frac{1}{Car^2} \frac{dr}{dx}$. Mesmo que este termo seja desprezível em escoamentos com superfícies livres entre placas paralelas, como um escoamento planar de Hele-Shaw, ele é fundamental em escoamentos entre superfícies divergentes, com é o caso do escoamento estudado neste trabalho.

Neste trabalho, uma estimativa da estabilidade do escoamento bidimensional é apresentada, baseada na idéia de Graham (2003) [57] de usar um sistema de coordenadas cilíndrico local, mas sem desprezar o termo relacionado com a variação da curvatura na direção azimutal. Por este novo critério, o escoamento será estável quando (os efeitos gravitacionais foram desprezados)

$$\frac{\sigma}{R^2(r)} \frac{dR(r)}{dr} - \frac{\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{rr}}{R(r)} + \sigma N^2 > 0. \quad (2-14)$$

Esta equação será utilizada para estimar a estabilidade dos escoamentos bidimensionais calculados neste trabalho.