

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO



Erick Fabrício Quintella Andrade Coêlho

**Deslocamento de Líquidos Viscoelásticos
em Tubos Capilares**

Análise Numérica e Experimental

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio como parte dos requisitos parciais para obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica

Orientador: Prof. Paulo Roberto de Souza Mendes
Co-Orientador: Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Rio de Janeiro
Agosto de 2005

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO



Erick Fabrício Quintella Andrade Coêlho

**Deslocamento de Líquidos Viscoelásticos
em Tubos Capilares**

Análise Numérica e Experimental

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC–Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Paulo Roberto de Souza Mendes

Orientador

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Márcio da Silveira Carvalho

Co-Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC–Rio

Luis Fernando Alzuguir Azevedo

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Mônica Feijó Naccache

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Francisco Ricardo da Cunha

Universidade de Brasília

Geraldo Afonso Spinelli Martins Ribeiro

E&P-ENGP/TPP/EE - Petrobras

José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico –
PUC-Rio

Rio de Janeiro, 19 de Agosto de 2005

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Erick Fabrício Quintella Andrade Coêlho

Graduou-se em Engenharia Mecânica na Universidade Federal do Pará (Pará, Brasil), obteve seu mestrado na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (Rio de Janeiro, Brasil).

Ficha Catalográfica

Coêlho, Erick Fabrício Quintella Andrade

Deslocamento de Líquidos Viscoelásticos em Tubos Capilares/Erick Fabrício Quintella Andrade Coêlho; orientador: Paulo Roberto de Souza Mendes; co-orientador: Márcio da Silveira Carvalho. — Rio de Janeiro: PUC-Rio, Departamento de Engenharia Mecânica, 2005.

157 f.; 30 cm

Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia mecânica – Teses. 2. Escoamento com superfície livre. 3. Escoamento viscoelástico bifásico. 4. Interface gás-líquido. 5. Reologia I. Souza Mendes, Paulo Roberto de. II. Carvalho, Márcio da Silveira. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621.3

Agradecimentos

Aos professores Paulo Roberto e Márcio Carvalho, que bem mais do que bons orientadores na tese foram amigos e conselheiros durante esses importantes anos da nossa convivência.

A todo o corpo técnico do Laboratório de Termociências, em especial ao Deivid Ramos e à Tatiana Kerber, que me auxiliaram com a montagem experimental e com a avaliação dos dados obtidos.

Aos alunos de iniciação científica, José Roberto Siffert e Caroline Becker, pelo auxílio com o levantamento dos dados e com os experimentos.

Aos amigos do café filosófico, Roney Thompson, André Isnard, Edson Soares e Eduardo Stein, que me acompanharam nas eternas construções e reconstruções teóricas de um mundo cheio de maravilhosos e interessantes questionamentos.

Um agradecimento especial a Eduardo Stein Dutra, que se revelou um excelente amigo e companheiro. Sua ajuda foi imprescindível para o término desta tese.

Aos meus pais Jorge Luiz e Selma Quintella, seres maravilhosos que sempre me acompanharam.

À minha esposa amada, Aldaléa Ribeiro Quintella, fã número 1 na torcida pela minha vitória e porto seguro nos meus momentos mais desesperançados.

Ao Felipe Ribeiro Quintella.

Resumo

Coêlho, Erick Fabrízio Quintella Andrade; Souza Mendes, Paulo Roberto de; Carvalho, Márcio da Silveira. **Deslocamento de Líquidos Viscoelásticos em Tubos Capilares**. Rio de Janeiro, 2005. 157p. Tese de Doutorado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O deslocamento de um líquido em um tubo capilar pela injeção de um gás ocorre em muitas situações, tais como na recuperação avançada de petróleo, no revestimento de conversores catalíticos e na moldagem assistida por injeção de gás. Geralmente o líquido deslocado é uma solução polimérica ou uma dispersão, que é não Newtoniana. Forças viscoelásticas alteram o balanço de forças em várias partes do escoamento e, conseqüentemente, alteram a eficiência do deslocamento, isto é, mudam a quantidade de líquido deixada na parede do capilar. Modelos de tais escoamentos devem se basear em teorias que levem em consideração o comportamento diferenciado de líquidos com microestrutura complexa, tanto no cisalhamento quanto na extensão. Além do mais, escoamentos de deslocamento envolvem uma superfície livre, e o domínio no qual as equações diferenciais são resolvidas é desconhecido a priori, fazendo parte da solução. Estas duas características tornam o problema extremamente complexo. Este problema foi estudado aqui tanto experimentalmente quanto teoricamente. Os experimentos consistiram da visualização do escoamento e medição da massa deslocada pela passagem de uma bolha de gás através de um tubo capilar preenchido por um líquido viscoelástico. Várias soluções de baixo peso molecular de Polietileno Glicol (PEG) e de alto peso molecular de Óxido de Polietileno (PEO) em água foram usadas a fim de avaliar os efeitos do comportamento viscoelástico no escoamento. As propriedades reológicas das soluções foram avaliadas tanto em cisalhamento quanto em extensão. Na análise teórica, o escoamento com superfície livre bidimensional próximo à interface gás-líquido foi modelado usando três equações diferenciais constitutivas distintas que aproximam o comportamento viscoelástico de soluções poliméricas diluídas, as quais são os modelos Oldroyd-B, FENE-P e FENE-CR, juntamente com as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento linear. O sistema de equações foi resolvido pelo Método dos Elementos Finitos. O sistema de equações algébricas não-lineares resultante foi resolvido pelo método de Newton. Os resultados mostram o efeito do caráter viscoelástico do líquido na forma da superfície livre e a espessura do filme líquido deixado na parede.

Palavras-chave

Escoamento com superfície livre, Escoamento viscoelástico bifásico, Interface gás-líquido, Reologia.

Abstract

Coêlho, Erick Fabrízio Quintella Andrade; Souza Mendes, Paulo Roberto de; Carvalho, Márcio da Silveira. **Displacement of Viscoelastic Liquids in Capillary Tubes**. Rio de Janeiro, 2005. 157p. PhD. Thesis — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

isplacement of a liquid in a capillary tube by gas injection occurs in many situations, like enhanced oil recovery, coating of catalytic converters and gas-assisted injection molding. Generally the liquid being displaced is a polymeric solution or dispersion, which is not Newtonian. Viscoelastic forces alter the force balance in various parts of the flow and consequently change the amount of liquid left attached to the capillary wall. Models of such flows must rely on theories that can account for the different behavior of microstructured liquids in simple shear and extensional flow. Moreover, displacement flows involve a free surface, and the domain where the differential equations are posed is unknown a priori being part of the solution. These two characteristics make the problem extremely complex. This problem was analyzed here both by experiments and theory. The experiments consisted of flow visualization and measurement of mass displaced by a gas bubble in a capillary tube filled with a viscoelastic liquid. Various solutions of low molecular weight Polyethylene Glycol (PEG) and high molecular weight Polyethylene Oxide (PEO) in water were used in order to evaluate the effect of viscoelastic behavior on the flow. The rheological properties of the solutions were evaluated both in simple shear and predominantly extensional flows. In the theoretical analysis, the two-dimensional free surface flow near the gas-liquid interface was modelled using three different differential constitutive equations that approximate viscoelastic behavior of dilute polymer solutions, namely Oldroyd-B, FENE-P and FENE-CR, together with momentum and continuity equations. The equation system was solved with the Finite Element Method. The resulting non-linear system of algebraic equations was solved by Newton's method. The results show the effect of the viscoelastic character of the liquid on the free surface shape and the film thickness attached to the capillary wall.

Keywords

Free surface flow, Two-phase viscoelastic flow, Gas-liquid interface, Rheology.

Conteúdo

1	Introdução	18
1.1	Motivação da investigação	18
1.2	Descrição do problema	20
1.3	Fluidos não Newtonianos	22
1.4	Estado da arte	24
1.5	Objetivos da investigação	29
1.6	Roteiro da tese	30
2	Formulação Matemática e Modelagem Computacional	32
2.1	Formulação de problemas de escoamento com superfície livre	32
2.2	Formulação do problema de deslocamento de líquidos viscoelásticos em um tubo	44
2.3	Modelagem computacional do problema de deslocamento de líquidos em um tubo (caso geral)	57
2.4	Modelagem computacional do problema de deslocamento de líquidos em um tubo (caso presente)	64
3	Resultados Numéricos	69
3.1	Topologia do mapeamento	69
3.2	Solução de problemas preliminares	69
3.3	Teste de malha	72
3.4	Resultados Newtonianos	75
3.5	Resultados Viscoelásticos	77
4	Métodos e Montagem Experimentais	95
4.1	Ferramentas de caracterização de fluidos	95
4.2	Montagem experimental e procedimentos	103
4.3	Detalhamento do procedimento experimental	110
4.4	Tratamento dos dados	111
5	Caracterização Reológica dos Líquidos de Trabalho	113
5.1	Escolha dos fluidos de trabalho	113
5.2	Preparação dos fluidos de trabalho	115
5.3	Viscosidade de cisalhamento e tensão superficial	116
5.4	Tempo de relaxação	116
5.5	Sumário das propriedades físicas dos fluidos de trabalho	121
6	Resultados Experimentais	122
6.1	Visualização da ponta da bolha	122
6.2	Espessura do revestimento - Gráficos $m \times Ca$	125
6.3	Espessura do revestimento - Gráficos $m/m_n \times We$	128
7	Comentários Finais e Sugestões	134
7.1	Comentários finais	134

7.2 Sugestões para trabalhos futuros	135
Referências Bibliográficas	140
A Funções Materiais para os Modelos Oldroyd-B, FENE-P e FENE-CR	141
B Coeficientes do Jacobiano Relativos às Equações dos Resíduos	145
C Análise de Incertezas	151
D Análise de Escala do Problema	154

Lista de Figuras

1.1	Representação de um processo de revestimento de superfícies internas de tubos.	19
1.2	Lado esquerdo: representação esquemática do processo de recuperação de óleo por injeção de fluido em um meio poroso. Lado direito: modelo físico do escoamento em um capilar.	19
1.3	Representação do problema de interesse em um sistema de referência posicionado na ponta da interface.	20
2.1	Configuração de um escoamento multifásico usada para motivar a descrição do escoamento com superfície livre.	33
2.2	Representação de uma interface separando duas fases fluidas.	37
2.3	Representação dos raios principais de curvatura, R_1 e R_2 .	42
2.4	Definição do ângulo de contato.	43
2.5	Representação das condições de contorno físicas do problema.	54
2.6	Mapeamento do domínio físico curvilíneo $\mathbf{x}(x, r)$ em um domínio numérico retangular $\boldsymbol{\xi}(\xi, \eta)$.	59
3.1	Mapeamento do domínio físico curvilíneo $\mathbf{x}(x, r)$ em um domínio numérico retangular $\boldsymbol{\xi}(\xi, \eta)$ para o caso $N_\eta \gg 1$.	69
3.2	Primeiro problema preliminar para solução de gás deslocando líquido Newtoniano.	70
3.3	Segundo problema preliminar para solução de gás deslocando líquido Newtoniano.	70
3.4	Terceiro problema preliminar para solução de gás deslocando líquido Newtoniano.	71
3.5	Características geométricas das malhas testadas. (a) Malha 1; (b) Malha 2; (c) Malha 3.	73
3.6	Componente da tensão polimérica ao longo da superfície livre obtido com o modelo Oldroyd-B para $Ca = 0, 1$. (a) $We = 0, 5$; (b) $We = 1, 5$.	74
3.7	Dependência da espessura do filme líquido Newtoniano depositado na parede do tubo com Ca .	76
3.8	Campo de escoamento Newtoniano em função de Ca . Padrões de linhas de corrente. (a) $Ca = 0, 1$; (b) $Ca = 0, 6$; (c) $Ca = 1$.	77
3.9	Evolução da razão da fração mássica m/m_N de um líquido de Oldroyd-B contra o número de Weissenberg para $Ca = 0, 1$.	81
3.10	Evolução da componente do tensor das tensões poliméricas tangente à linha de corrente com o aumento do número de Weissenberg para $Ca = 0, 1$. As linhas frontais representam linhas de corrente. A posição do anel de estagnação Newtoniano sobre a superfície livre é $s = 3, 206$. (a) $We = 0, 5$, $s = 3, 211$; (b) $We = 1, 0$, $s = 3, 116$; (c) $We = 1, 5$, $s = 2, 795$.	83

3.11	Efeito da variação do parâmetro de extensibilidade da molécula sobre a máxima componente de esticamento do tensor das tensões poliméricas na superfície livre. Resultados para $Ca = 0, 1$.	87
3.12	Campos da componente de esticamento do tensor das tensões poliméricas de uma solução de FENE-P ao longo das linhas de corrente em função de We para $Ca = 0, 1$. Linhas frontais representam linhas de corrente. (a)-(d) $b = 20$; (e)-(h) $b = 100$.	88
3.13	Efeitos de variação do parâmetro de extensibilidade da molécula na espessura de filme líquido. Resultados para $Ca = 0, 1$. (a) Modelo FENE-CR; (b) Modelo FENE-P.	89
3.14	Componente normal do tensor das tensões poliméricas ao longo de uma linha de corrente adjacente à linha de corrente que termina no ponto de estagnação na superfície livre, conforme indicado na figura. As previsões foram obtidas com o modelo FENE-CR e são apresentadas como função do número de Weissenberg, para $Ca = 0, 1$.	91
3.15	Componentes do tensor das tensões poliméricas dos modelos FENE-P e FENE-CR ao longo das linhas de corrente em função de We para $Ca = 0, 1$. Linhas frontais representam linhas de corrente. Resultados para $b = 100$. (a)-(d) Modelo FENE-CR; (e)-(h) Modelo FENE-P.	92
3.16	Efeitos pseudoplásticos na espessura do filme líquido.	93
3.17	Evolução da razão da fração mássica m/m_N com We . Os círculos correspondem aos dados experimentais viscoelásticos obtidos por Huzyak e Koelling, enquanto que os quadrados correspondem aos dados da simulação numérica de um modelo FENE-CR com $b = 150$ para $Ca = 0, 1$.	94
4.1	Esboço do tensiômetro de anel.	97
4.2	Viscosímetro utilizado.	98
4.3	Exemplos de geometrias usadas em um reômetro rotacional.	99
4.4	Afinamento e quebra de líquidos Newtoniano e viscoelástico.	101
4.5	Dispositivo de afinamento do capilar.	102
4.6	Montagem experimental.	103
4.7	Reservatório de fluidos.	105
4.8	Conexões com o tubo capilar.	106
4.9	Tanque retangular usado como câmara de visualização.	107
4.10	Conjunto de válvulas e agulha de controle.	108
4.11	Balança de precisão.	108
4.12	Câmera CCD.	109
5.1	Viscosidade inerente versus concentração de PEO.	118
5.2	Seqüência temporal do dispositivo de "capillary thinning".	119
5.3	Perfil dos filamentos dos líquidos ensaiados para um mesmo instante.	120
6.1	Frente da bolha para três soluções poliméricas; uma Newtoniana (PEG 50%), e duas viscoelásticas (PEO 4 milhões e PEO 8 milhões).	123

6.2	Massa depositada na parede em função do número de capilaridade.	126
6.3	Efeito da concentração polimérica na massa depositada na parede em função do número de capilaridade.	127
6.4	Efeito do peso molecular na massa depositada na parede em função do número de capilaridade.	128
6.5	Razão de frações mássicas adimensionais em função do número de Weissenberg.	129
6.6	Razão de frações mássicas adimensionais em função do número de Weissenberg - curvas de tendência.	130
6.7	Comparação das curvas de tendência - experimental e numérica.	132
D.1	Análise de escala do problema de deslocamento de fluidos em um tubo capilar.	154

Lista de Tabelas

5.1	Estimativa do tempo de relaxação das soluções baseada em medições da viscosidade inerente.	119
5.2	Estimativa do tempo de relaxação das soluções baseada em experimentos de “capillary thinning”.	120
5.3	Sumário das propriedades físicas.	121
C.1	Propagação das incertezas na fração mássica depositada na parede do tubo capilar.	153
C.2	Propagação das incertezas no número de capilaridade do escoamento.	153

Lista de Símbolos

Símbolos romanos

Ca - número de capilaridade

We - número de Weissenberg

De - número de Deborah

N_η - razão de viscosidades

m - fração adimensional de massa de líquido depositada na parede

M - massa de líquido coletada

M_w - peso molecular

m/m_N - razão da fração mássica

R_0 - raio do tubo capilar

R_b - raio da bolha semi-infinita formada pelo fluido deslocador

R_m - raio médio de curvatura da interface

U - velocidade da ponta da bolha

\bar{U} - velocidade média da fase deslocada

\mathbf{u} - vetor velocidade

\mathbf{T} - tensor das tensões

\mathbf{g} - vetor aceleração da gravidade, tensor gradiente interpolado

g - aceleração da gravidade (intensidade)

G - módulo de elasticidade

p - pressão

\mathbf{I} - tensor unitário

\mathbf{t} - vetor tangente unitário

\mathbf{n} - vetor normal unitário

\mathbf{x} - vetor posição do sistema de coordenadas físicas

c - concentração

t - coordenada temporal

r - coordenada radial

x - coordenada axial

s - coordenada da superfície

v - velocidade radial

u - velocidade axial

n - número de moléculas por unidade de volume

\mathbf{Q} - vetor comprimento da mola nos modelos FENE

Q_0 - máximo comprimento da mola nos modelos FENE

\mathbf{F} - tensão na mola nos modelos FENE, matriz de transformação de coordenadas

k - constante de Boltzmann

T - temperatura absoluta

H - constante da mola nos modelos FENE

b - parâmetro de extensibilidade finita

\mathcal{M} - função de transformação de coordenadas

\mathbf{G} - tensor gradiente de velocidade interpolado

\mathbf{J} - matriz Jacobiana do método de Newton

\mathbf{R} - vetor resíduo ponderado

U_k^i - velocidade horizontal no nó i

V_k^i - velocidade vertical no nó i

P_k^i - pressão no nó i

X_k^i - coordenada horizontal no nó i

R_k^i - coordenada vertical no nó i

D_ξ - coeficiente de difusão da malha da coordenada ξ

D_η - coeficiente de difusão da malha da coordenada η

Símbolos gregos

$\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ - tensor taxa de deformação

$\dot{\gamma}$ - taxa de deformação (intensidade de $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$) $\equiv \sqrt{1/2 \text{tr } \dot{\boldsymbol{\gamma}}^2}$

Δx - distância percorrida pela bolha

Δt - intervalo de tempo

η - viscosidade total da fase líquida

μ - viscosidade Newtoniana

ρ - massa específica

σ - tensão superficial

$\boldsymbol{\tau}$ - tensor das tensões viscosas

τ - tensão (intensidade de $\boldsymbol{\tau}$) $\equiv \sqrt{1/2 \text{tr } \boldsymbol{\tau}^2}$

λ - tempo de relaxação, constante de tempo

φ - ângulo de contato

ϕ_j - funções base para as velocidades e as coordenadas da malha

χ_j - funções base para a pressão

ψ_j - funções base para o gradiente de velocidade interpolado e o tensor polimérico

ψ - função de distribuição de configuração

$\boldsymbol{\kappa}$ - tensor gradiente transposto da velocidade

ζ - coeficiente de atrito