

2

Formulação Matemática e Modelagem Computacional

2.1

Formulação de problemas de escoamento com superfície livre

Uma característica distinta do escoamento de fluidos com superfície livre¹, quando comparados com outros escoamentos, é a existência de interfaces fluido-fluido (ou seja, gás-líquido ou líquido-líquido). Interfaces exercem um efeito marcante no escoamento de fluidos e, portanto, exigem que se compreenda o fenômeno a fim de modelar corretamente problemas de escoamento de sua categoria.

A fim de motivar o tratamento matemático do escoamento com superfície livre, considere a configuração física específica mostrada na fig.(2.1). Aqui, duas porções de fluidos imiscíveis estão escoando no domínio como mostrado. A seguir, procede-se à identificação das equações e das condições de contorno que governam o escoamento com uma interface de separação dos fluidos. Apesar do exemplo particular, as equações a serem apresentadas são gerais e podem ser usadas em qualquer configuração, não estando restritas ao escoamento da fig.(2.1).

Escoamentos multifásicos, tais como o mostrado na fig.(2.1), são uma combinação de escoamentos de fases fluidas simples², conectados através do seu contato em interfaces. Assim, ao definir as equações que governam a mecânica de escoamentos multifásicos, que englobam a conservação de

¹Uma discussão mais detalhada sobre as notas que se seguem pode ser encontrada no capítulo 2 do livro *Liquid Film Coating*, editado por S. F. Kistler e P. M. Schweizer e publicado em 1997 por Chapman & Hill em Londres.

²No escoamento de fluidos onde existe mais de um fluido, é comum referir-se a cada fluido como uma fase, não importando se o fluido é um gás ou um líquido

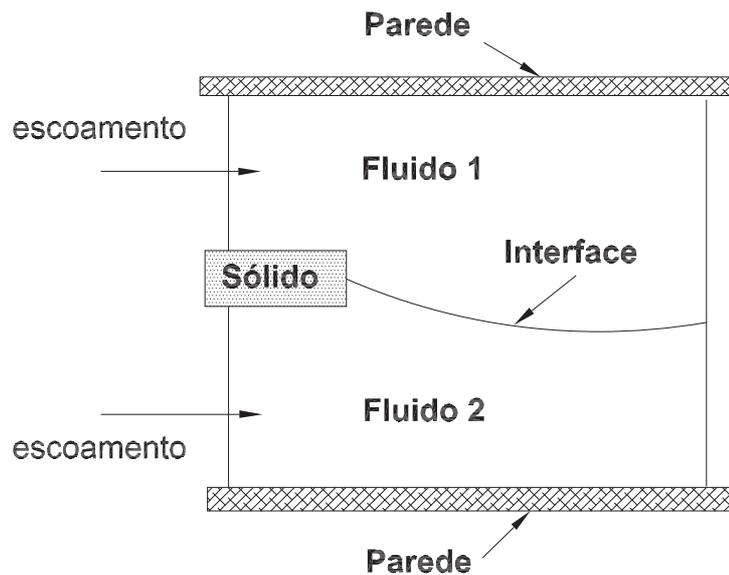


Figura 2.1: Configuração de um escoamento multifásico usada para motivar a descrição do escoamento com superfície livre.

massa e a conservação de quantidade de movimento, examina-se o escoamento de uma única fase. As características únicas conferidas ao escoamento pela interface e pelas fronteiras sólidas entram na descrição da mecânica de escoamentos multifásicos como condições de contorno, que são apresentadas subseqüentemente às considerações das equações de conservação para uma fase fluida simples. Como a presente investigação será idealizada em regime isotérmico, a equação de conservação da energia fica idênticamente satisfeita, não sendo necessário, portanto, abordá-la.

2.1.1 Equações de conservação

O menor “corpo” de fluido que pode ser estudado ainda dentro das restrições da mecânica do contínuo é chamado de elemento de fluido. As equações da mecânica dos fluidos governam o movimento dos elementos de fluido. Tais equações podem ser derivadas da aplicação de leis de conservação a uma coleção de elementos de fluido, também chamados pontos materiais, que por definição consistem sempre das mesmas partículas de fluido à

medida que as fronteiras do corpo material são distorcidas e transladam no tempo. Estas equações, na sua forma diferencial, são apresentadas abaixo:

Conservação de massa

A equação de conservação de massa estabelece que não pode haver taxa líquida de massa adicional dentro de um volume fixo no escoamento. Em termos da derivada material

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

escreve-se:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0, \quad (2-1)$$

em que ρ é a massa específica do fluido e \mathbf{u} é o seu vetor velocidade.

Conservação de quantidade de movimento linear

A equação de conservação de quantidade de movimento linear estabelece que o produto massa x aceleração de um elemento de fluido é igual à soma das forças atuando na superfície do corpo (cuja informação está armazenada no tensor das tensões) com as forças atuando no volume do corpo (considerando, aqui, apenas as forças gravitacionais):

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{g} \quad (2-2)$$

A fim de utilizar a forma diferencial da equação de conservação de quantidade de movimento linear, necessita-se relacionar o tensor das tensões \mathbf{T} ao tipo de fluido e de escoamento. Tal relação é chamada uma equação constitutiva, e a sua determinação é objeto de ocupação da ciência chamada Reologia. Geralmente, estas relações são determinadas experimentalmente. Qualquer equação constitutiva pode ser postulada. Entretanto, a justificativa para tal postulado deve residir no acordo entre as previsões teóricas resultantes e as observações experimentais para o fluido

em particular. Além do mais, Oldroyd [35] propôs que, para uma equação constitutiva ser admissível (ou reologicamente invariante) a mesma deve obedecer a três quesitos:

1. Ser invariante na forma sob uma mudança do sistema de coordenadas;
2. Ser invariante nos valores sob uma mudança translacional ou rotacional do elemento de fluido à medida que o mesmo se desloca no espaço;
3. Ser invariante nos valores sob uma mudança da história reológica de elementos de fluido vizinhos.

Acontece que todas as equações constitutivas relevantes aos escoamentos com superfície livre são uma soma de forças de pressão com forças viscosas. Assim, o tensor das tensões pode ser escrito como

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad (2-3)$$

em que \mathbf{I} e $\boldsymbol{\tau}$ são, respectivamente, o tensor identidade e o tensor das tensões viscosas ou tensor extra tensão. Conseqüentemente, os esforços da Reologia para identificar equações constitutivas devem ser concentrados na determinação da forma apropriada do tensor extra tensão.

2.1.2 Condições de contorno

Na solução de um problema de mecânica dos fluidos, a variação no campo de escoamento depende da importância relativa dos vários termos nas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento linear. A importância de cada termo pode ser determinada através de argumentos que implicitamente dependem da interação do escoamento com as paredes sólidas e com o gás que circunda o domínio do escoamento. Isto salienta a importância física que as fronteiras do domínio de um escoamento têm sobre o próprio escoamento do fluido. Para enfatizar ainda mais esse ponto, note-se que até agora as leis de conservação apresentadas são geralmente

aplicadas a uma fase única do escoamento. Assim, para o domínio mostrado na fig.(2.1), a conservação de massa e de quantidade de movimento linear são aplicadas a cada fase separadamente. Claramente, para o caso em que duas fases distintas de fluidos entram em contato, o caráter único do escoamento resultante é determinado pelas condições aplicadas ao longo da interface fluido-fluido. A informação física introduzida através dos contornos satisfaz o requisito matemático de que condições de contorno são necessárias para resolver unicamente as equações diferenciais que governam a mecânica dos fluidos. A seguir, consideram-se as diversas condições de contorno que são geralmente aplicadas a escoamentos com superfície livre.

Condição de contorno cinemática

A *condição de contorno cinemática* fornece uma restrição ao escoamento estabelecendo a satisfação da conservação de massa através das fronteiras do domínio do escoamento. Em notação tensorial:

$$\rho_1(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_\sigma) \cdot \mathbf{n}_1 - \rho_2(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_\sigma) \cdot \mathbf{n}_1 = 0 \quad \text{na interface.} \quad (2-4)$$

Nesta equação, ρ_1 e ρ_2 são as massas específicas das fases 1 e 2, \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 são as velocidades das fases 1 e 2, \mathbf{u}_σ é a velocidade da interface e \mathbf{n}_1 é o vetor unitário normal à interface que aponta na direção da fase 2. Na fig.(2.2) de referência, \mathbf{t} é o vetor unitário tangente à interface e os vetores normais obedecem à convenção $\mathbf{n}_1 = -\mathbf{n}_2$.

A eq.(2-4) é a forma geral da condição de contorno cinemática (também chamada de salto no balanço de massa), e aplica-se tanto para fronteiras permeáveis quanto impermeáveis. Se, por exemplo, a fase 1 é um sólido impermeável, sua componente normal da velocidade, $\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1$, será idêntico ao componente normal da velocidade da superfície, $\mathbf{u}_\sigma \cdot \mathbf{n}_1 = u_\sigma$. Assim, a eq.(2-4) simplifica-se para

$$\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_1 = u_\sigma \quad \text{na superfície,} \quad (2-5)$$

significando que o componente da velocidade do fluido normal à superfície

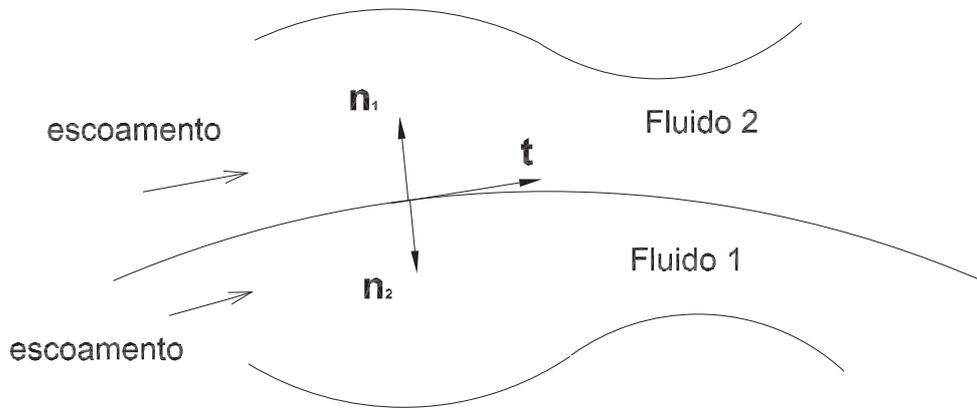


Figura 2.2: Representação de uma interface separando duas fases fluidas.

sólida é igual ao componente normal da velocidade do sólido em si. Se, por outro lado, a fase 1 também é um fluido, de modo que a fronteira sólida é substituída por uma interface fluido-fluido através da qual não há transferência de massa, então a eq.(2-4) indica que a fase 1 satisfaz

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 = u_\sigma \quad \text{na interface,} \quad (2-6)$$

enquanto que para a fase 2 a eq.(2-5) permanece válida.

Condição de não deslizamento

A eq.(2-4) apresenta uma relação entre o componente normal da velocidade em cada fase em uma interface e sua relação com a velocidade da interface em si. Também há uma necessidade de restringir o movimento de elementos de fluido em cada fase ao longo da interface. Uma hipótese largamente utilizada em escoamentos viscosos é que a componente tangencial da velocidade é contínua através de superfícies em contato. Esta hipótese é aplicada tanto para superfícies sólidas quanto fluidas. Em outras palavras, supõe-se que a componente tangencial da velocidade da fase 1 é igual

à componente tangencial da velocidade da fase 2 na superfície de contato.

Em notação tensorial:

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{t} = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{t}, \quad (2-7)$$

em que \mathbf{t} é o vetor unitário tangente à superfície. Se a superfície em contato com o fluido é a de um sólido, prescreve-se a velocidade do sólido como \mathbf{u}_s , e reescreve-se a eq.(2-7) como

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{t} = \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{t}. \quad (2-8)$$

Esta *condição de não deslizamento* fornece previsões de escoamento em excelente acordo com experimentos para uma larga faixa de configurações físicas. Há, entretanto, uma exceção digna de nota em que análises matemáticas do escoamento que utilizam esta condição de contorno apresentam dificuldades. A exceção surge em campos do escoamento que envolvem uma interface fluido-fluido móvel onde a interface está em contato com uma parede sólida (na literatura inglesa é conhecida como *moving contact line problem*). Porém, mesmo em tais casos, a condição de não deslizamento pode ser aplicada sobre o domínio geral do fluido, ficando as dificuldades matemáticas restritas a uma região próxima da vizinhança da linha de contato entre a interface e a superfície sólida.

Aplicação das condições cinemática e de não deslizamento a uma interface fluido-fluido impermeável

A condição de contorno cinemática e a condição de não deslizamento, juntamente com as equações de conservação, perfazem tudo o que é necessário para descrever o escoamento de uma fase única de um fluido em contato com uma superfície sólida rígida. Estas condições também se aplicam a um escoamento de múltiplas fases. Considere, por exemplo, a interface fluido-fluido mostrada na fig.(2.1). Como a condição de não deslizamento se aplica na interface, vale a eq.(2-7). Além do mais, a condição cinemática deve ser aplicada para ambos os fluidos na interface fluido-fluido. No escoamento considerado, a taxa de transferência de massa entre as fases é normalmente

pequena o suficiente de modo que seu impacto no escoamento é desprezível, e assim a condição cinemática para uma superfície impermeável é dada pelas eqs.(2-5) e (2-6). Combinando-se estas equações, obtém-se

$$\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}, \quad \text{na interface,} \quad (2-9)$$

onde se removeu o índice do vetor normal por entender aqui que \mathbf{n} é um vetor unitário normal à superfície. As eqs.(2-7) e (2-9) juntas implicam que

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \quad \text{na interface,} \quad (2-10)$$

isto é, a velocidade deve ser contínua através de uma interface impermeável. Note-se, entretanto, que a eq.(2-10) não diz nada sobre a restrição de impenetrabilidade que deve existir na interface fluido-fluido. Assim, a condição cinemática para uma das fases (dada pela eq.(2-5) ou pela (2-6)) deve ser aplicada junto com a eq.(2-10) a fim de prover informação essencial sobre o movimento da interface, bem como das duas fases sobre a interface.

Condição de contorno dinâmica

Até agora, a discussão envolvendo condições de contorno limitou-se puramente a considerações cinemáticas (do movimento). A forma na qual tensões se transmitem através de uma interface ou, o que é equivalente, a forma na qual forças se equilibram em uma interface precisa ser igualmente considerada.

Aplicando-se um balanço de forças num corpo material que contém duas fases fluidas distintas pode-se obter a forma diferencial da condição de contorno de tensões na interface:

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1) + \nabla^s \cdot \mathbf{T}_\sigma = 0 \quad \text{na interface.} \quad (2-11)$$

Aqui, \mathbf{T}_1 e \mathbf{T}_2 são tensores representativos das tensões exercidas pelas fases 1 e 2, respectivamente, sobre a interface. Entretanto, muitos fenômenos observados na mesma só podem ser explicados através da introdução de um

termo adicional representativo de uma tensão (força superficial) exercida pela própria interface sobre o escoamento. Este tensor é denotado por \mathbf{T}_σ , que é o tensor das tensões atuando na interface entre os fluidos. O termo $\nabla^s \cdot \mathbf{T}_\sigma$ representa o fluxo de tensões ao longo da interface, em que ∇^s é o operador divergente decomposto no plano tangente à superfície de contato entre os fluidos, que se relaciona com o operador divergente tridimensional como

$$\nabla^s = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla. \quad (2-12)$$

A eq.(2-11) é chamada de *condição de contorno dinâmica*, assim denominada por possuir sua origem num balanço de forças. Basicamente, a mesma estabelece que se a interface possui a habilidade de exercer uma força num corpo material, que é caracterizada por um valor não nulo de \mathbf{T}_σ , então surge um salto de tensões através da interface. Por outro lado, se a interface não possui nenhuma propriedade indutora de forças, então $\mathbf{T}_\sigma = \mathbf{0}$ e a eq.(2-11) torna-se

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1) = 0 \quad \text{na interface}, \quad (2-13)$$

o que indica uma continuidade de tensões através da interface.

Como no caso do tensor das tensões superficiais, \mathbf{T} , deve-se definir uma equação constitutiva a fim de relacionar \mathbf{T}_σ a quantidades físicas associadas à interface, e a justificativa para qualquer tal relação reside novamente no acordo entre teoria e experimento. A equação constitutiva mais simples é dada por

$$\mathbf{T}_\sigma = \sigma \mathbf{I}^s, \quad (2-14)$$

em que σ é a tensão superficial e \mathbf{I}^s é o tensor identidade no plano tangente à superfície de contato entre os fluidos, definido em termos do tensor identidade tridimensional, \mathbf{I} , como

$$\mathbf{I}^s = \mathbf{I} - \mathbf{nn}. \quad (2-15)$$

Substituindo as eqs.(2-14) e (2-15) na eq.(2-11), aplicando várias identidades

tensoriais e empregando a eq.(2-12) chega-se a

$$(p_1 - p_2)\mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_1) + \nabla^s \sigma - \frac{\sigma \mathbf{n}}{R_m} = 0 \quad \text{na interface.} \quad (2-16)$$

Aqui, R_m é o raio médio de curvatura da interface, que se relaciona com o vetor normal unitário apontado para fora como

$$\frac{1}{R_m} = \frac{1}{2} \nabla^s \cdot \mathbf{n}. \quad (2-17)$$

Para o caso estático, os únicos termos não nulos na eq.(2-16) estão na direção normal, e a eq.(2-16) fica

$$\Delta p = p_1 - p_2 = \frac{2\sigma}{R_m} \quad \text{na interface.} \quad (2-18)$$

A equação constitutiva mais simples (eq.(2-14)) é responsável pelo efeito da tensão superficial no salto de pressão através de uma interface curva, como descrito originalmente por Young e Laplace.

Para dar uma interpretação física do raio médio de curvatura, R_m , considere a fig.(2.3). O raio médio de curvatura de uma interface em um dado ponto pode ser visualizado pela construção de dois planos perpendiculares, Pl_1 e Pl_2 , cuja linha de interseção coincide com o vetor normal, \mathbf{n} , apontado para fora naquele ponto. As interseções da interface com cada plano fornecem duas curvas, C_1 e C_2 . O raio médio de curvatura relaciona-se com a curvatura destas duas curvas no ponto de interesse. Determina-se a curvatura de cada curva fazendo com que dois círculos (círculo de raio R_1 e círculo de raio R_2) tangenciem cada curva no ponto de interesse de modo tal que as primeiras e segundas derivadas dos círculos no ponto sejam iguais às derivadas das curvas. Assim, o raio médio de curvatura no ponto de interesse é dado por

$$\frac{1}{R_m} = \pm \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2-19)$$

onde a escolha apropriada do sinal depende da configuração do problema em questão.

A relação matemática entre o raio médio de curvatura e a parame-

trização de uma dada superfície é uma função não linear complicada da forma da superfície. Logo, com exceção de formas simples tais como superfícies planas, cilíndricas e esféricas, em que $1/R_m$ é uma constante, a aparência de tal expressão matemática na condição de contorno dinâmica torna os sistemas com interface extremamente difíceis de se resolver exatamente.

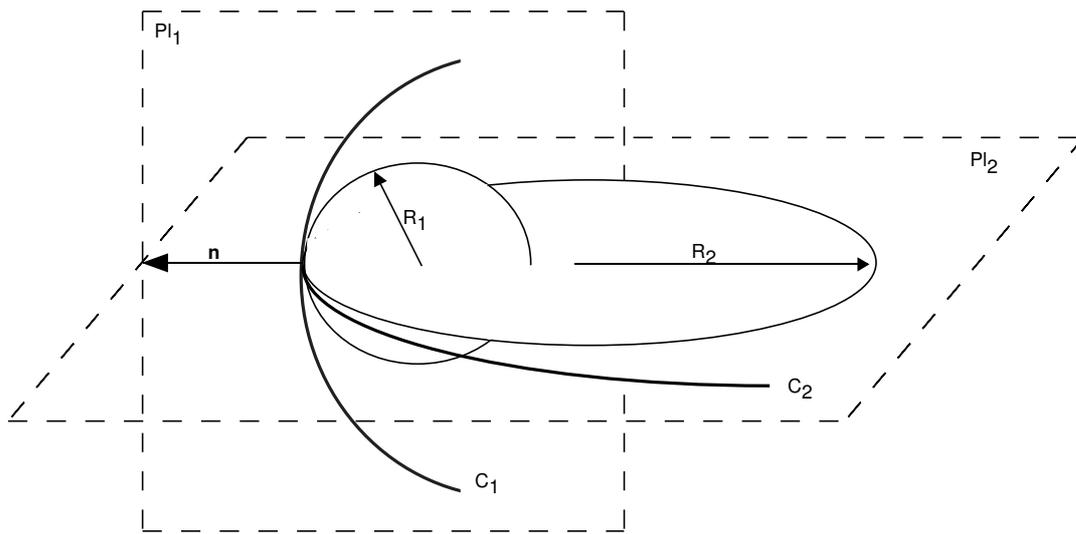


Figura 2.3: Representação dos raios principais de curvatura, R_1 e R_2 .

Ângulos de contato

A expressão matemática para a curvatura de uma interface arbitrária possui derivadas na interface, implicando na necessidade de condições de contorno adicionais na determinação da parametrização da interface. Em problemas de superfície livre, é comum ter uma ou mais interfaces fluido-fluido entrando em contato com uma superfície sólida. Tal linha tocando a superfície sólida é chamada de *linha de contato*, e o ângulo de interseção da linha de contato com a superfície sólida, φ , é chamado de *ângulo de contato* (ver fig.(2.4)). A localização da linha de contato, ou a variação no ângulo de contato ao longo desta linha, fornece as condições de contorno necessárias para resolver as formas da interface.

Ângulos de contato apresentam duas propriedades básicas:

1. Em um caso estático, em que não há escoamento, o ângulo de contato é profundamente afetado pelas características da superfície sólida, dos fluidos e da interface. Assim, mudando as propriedades do material do sistema é provável que se varie o valor deste ângulo.
2. Em um caso em que a linha de contato se move, o ângulo de contato (agora referido como ângulo de contato dinâmico), ainda é afetado pelas propriedades do material. Entretanto, ângulos de contato dinâmicos observados experimentalmente, chamados de ângulos de contato aparentes, dependem também do campo de escoamento encontrado no domínio de medição.

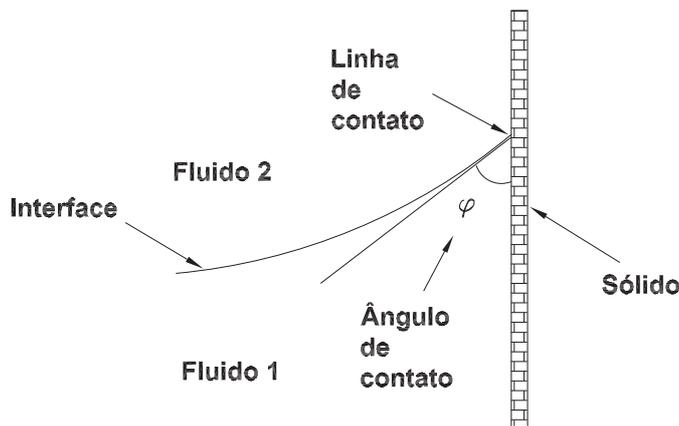


Figura 2.4: Definição do ângulo de contato.

A necessidade de impor restrições à interface em si, tais como o valor do ângulo de contato ou a localização da linha de contato, está intimamente relacionada ao surgimento do termo de curvatura na condição de contorno dinâmica. Nos casos em que a interface possui tensão superficial nula, ou nos casos em que o operador divergente na superfície é desprezado por meio de aproximações, um sistema de equações ficará superespecificado se condições de ângulo de contato ou linha de contato forem impostas na interface sem relaxar outras restrições no domínio.

2.2

Formulação do problema de deslocamento de líquidos viscoelásticos em um tubo

O deslocamento de fluidos em tubos é um caso particular do problema de escoamento com superfície livre. Sendo esse o objeto de interesse desta tese, apresenta-se a seguir a forma apropriada das equações de conservação, bem como das condições de contorno, relevantes ao problema específico.

2.2.1

Equações de conservação

As equações que governam o problema hidrodinâmico do deslocamento de fluidos incompressíveis em um tubo são a equação de conservação da massa e a equação de conservação da quantidade de movimento linear, particularizadas e escritas abaixo em notação tensorial.

1. Equação de conservação da massa

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_k = 0 \quad (2-20)$$

2. Equação de conservação da quantidade de movimento linear

$$\rho_k \mathbf{u}_k \cdot \nabla \mathbf{u}_k = -\nabla p_k + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k + \rho_k \mathbf{g} \quad (2-21)$$

Note que ambos os escoamentos ocorrem em regime permanente. Estas equações devem ser satisfeitas pelas duas fases fluidas, que são identificadas segundo o valor 1 ou 2 do índice k representativo da fase em questão e correspondente à convenção da fig.(1.3). O sistema de referência é posicionado no cruzamento da linha de simetria do escoamento com a interface entre os dois fluidos (ponta da bolha)³. Deste modo, a bolha permanece fixa enquanto as paredes se movem com velocidade constante. O vetor velocidade é denotado por \mathbf{u} , a pressão por p , a aceleração da gravidade

³É comum referir-se à fase que penetra no outro fluido como uma longa bolha de fluido

local por \mathbf{g} , a massa específica por ρ e o tensor extra tensão por $\boldsymbol{\tau}$. O tensor extra tensão varia com o tensor taxa de deformação do escoamento segundo o modelo constitutivo utilizado.

Como o escoamento se dá em um tubo, apresentam-se a seguir as equações de conservação em coordenadas cilíndricas.

1. Equação de conservação da massa

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_k) + \frac{\partial}{\partial x} (u_k) = 0 \quad (2-22)$$

2. Equação de conservação da quantidade de movimento linear na direção axial

$$\rho_k \left(v_k \frac{\partial u_k}{\partial r} + u_k \frac{\partial u_k}{\partial x} \right) = \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{(rx)_k}) + \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{(xx)_k}) \right] - \frac{\partial P_k}{\partial x} \quad (2-23)$$

3. Equação de conservação da quantidade de movimento linear na direção radial

$$\rho_k \left(v_k \frac{\partial v_k}{\partial r} + u_k \frac{\partial v_k}{\partial x} \right) = \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{(rr)_k}) - \frac{\tau_{(\theta\theta)_k}}{r} + \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{(rx)_k}) \right] - \frac{\partial P_k}{\partial r} + \rho_k g \quad (2-24)$$

Nestas equações, u e v são as componentes da velocidade nas direções axial e radial, respectivamente, g é a componente da aceleração da gravidade local na direção radial e τ_{rx} , τ_{xx} , τ_{rr} , τ_{xr} e $\tau_{\theta\theta}$ são as componentes do tensor extra tensão.

2.2.2 Modelos constitutivos

Na solução do problema de deslocamento de fluidos, assim como na solução de um problema geral de mecânica dos fluidos, depara-se com o seguinte desafio: dado um problema específico, procura-se obter o perfil de velocidade do escoamento por meio da solução das equações de conservação

utilizando um modelo constitutivo conveniente (uma equação constitutiva nada mais é do que uma expressão para o tensor das tensões em função de alguns tensores cinemáticos); em seguida utiliza-se a distribuição de velocidade obtida para adquirir informações de interesse do problema específico.

Nesta tese deseja-se investigar no problema complexo de deslocamento de fluidos os efeitos dinâmicos de certos fluidos elásticos. Como a escolha do modelo constitutivo deve refletir as características reológicas do fluido de trabalho, bem como da complexidade do escoamento de interesse, procura-se utilizar aqui equações constitutivas mais gerais que sejam úteis em escoamento arbitrários.

Para analisar numericamente a física do esticamento de polímeros, bem como determinar as modificações no campo de escoamento devido ao deslocamento de líquidos viscoelásticos em tubos capilares, supõe-se o líquido viscoelástico como sendo uma solução polimérica diluída com n moléculas poliméricas por unidade de volume. Supõe-se também que o solvente é um líquido Newtoniano com viscosidade η_s .

Idealiza-se a molécula polimérica como um haltere elástico (elastic dumbbell), isto é, duas massas esféricas conectadas por uma mola. As massas representam segmentos moleculares de vários monômeros e a mola descreve os efeitos entrópicos aos quais um vetor conectando as duas extremidades do polímero está sujeito. Existem muitos tipos de modelos de halteres elásticos, dependendo da escolha para a lei que prescreve a força na mola. Sabe-se que os modelos de halteres são representações bastante pobres das moléculas poliméricas, no entanto eles têm se mostrado muito úteis no desenvolvimento de uma compreensão elementar, porém vasta, de relações entre movimentos macromoleculares e fenômenos reológicos.

A teoria cinética para os halteres consiste de duas partes principais, uma das quais é o desenvolvimento de uma equação para a função de distribuição da configuração (chamada “equação de difusão” por descrever como o sistema de pontos “se difunde” no espaço de configurações multidimensional apropriado para o modelo molecular), e a outra é o desenvolvimento de uma expressão para o tensor extra-tensão. A seguir apresenta-se um breve resumo dos passos principais para deduzir os três modelos escolhidos:

Oldroyd-B, FENE-P e FENE-CR (detalhes podem ser encontrados em Bird *et al.* [3]).

“Equação de difusão”

Na ausência de forças externas, a “equação de difusão” para a função de distribuição de configuração $\psi(\mathbf{Q}, t)$ é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} = & - \left([\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{Q}] \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \psi \right) + \frac{2}{\zeta} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \mathbf{F} \psi \right) + \\ & + \frac{2kT}{\zeta} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \psi \right), \end{aligned} \quad (2-25)$$

em que $\boldsymbol{\kappa} = \nabla \mathbf{u}^T$, \mathbf{Q} é o vetor tridimensional que conecta as massas, \mathbf{F} é a tensão na mola, ζ é o coeficiente de atrito, k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. O primeiro termo do lado direito da equação resulta de forças hidrodinâmicas de arrasto (causadas pelo movimento dos halteres através do solvente), o segundo termo resulta da força na mola e o último termo resulta de forças Brownianas nas massas (devido a flutuações térmicas no solvente). Como supõe-se o líquido incompressível, $\text{tr } \boldsymbol{\kappa} = 0$. Por simplicidade supõe-se um campo de escoamento homogêneo, uma hipótese que deve ser evitada quando o gradiente de velocidade muda significativamente em uma distância comparável ao tamanho das moléculas poliméricas.

Para uma função arbitrária $B(\mathbf{Q})$ do vetor de conexão, a média espacial (dependente do tempo) da configuração é dada por

$$\langle B \rangle = \int B(\mathbf{Q}) \psi(\mathbf{Q}, t) d\mathbf{Q}, \quad (2-26)$$

em que os colchetes $\langle \rangle$ indicam uma média formada com a função de distribuição $\psi(\mathbf{Q}, t)$. É oportuno mencionar que multiplicando a eq.(2-25) por qualquer função do vetor de conexão, $B(\mathbf{Q})$, e em seguida integrando sobre todo o espaço de configuração obtém-se a equação de transporte para

$\langle B \rangle$:

$$\frac{D}{Dt} \langle B \rangle = \left(\boldsymbol{\kappa} : \left\langle \mathbf{Q} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} B \right\rangle \right) - \frac{2}{\zeta} \left\langle \left(\mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} B \right) \right\rangle + \frac{2kT}{\zeta} \left\langle \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} B \right) \right\rangle. \quad (2-27)$$

Uma relação semelhante se aplica a uma função tensorial $\mathbf{B}(\mathbf{Q})$ de qualquer ordem. Particularmente, quando \mathbf{B} é o tensor de segunda ordem $\mathbf{Q}\mathbf{Q}$:

$$\frac{D}{Dt} \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - \boldsymbol{\kappa} \cdot \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle \cdot \boldsymbol{\kappa}^T = \frac{4kT}{\zeta} \mathbf{I} - \frac{4}{\zeta} \langle \mathbf{Q}\mathbf{F} \rangle, \quad (2-28)$$

ou

$$\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle_{(1)} = \frac{4kT}{\zeta} \mathbf{I} - \frac{4}{\zeta} \langle \mathbf{Q}\mathbf{F} \rangle, \quad (2-29)$$

em que o subscrito (1) denota a operação de diferenciação segundo derivadas convectadas. Em um sistema em equilíbrio (isto é, $\boldsymbol{\kappa} = 0$ e ausência de forças externas), a eq.(2-29) fornece

$$\langle \mathbf{Q}\mathbf{F} \rangle_{eq} = kT\mathbf{I}. \quad (2-30)$$

Tensor extra-tensão

Uma vez que $\psi(\mathbf{Q}, t)$ para um dado campo de escoamento tenha sido encontrada e que a equação de transporte tenha sido determinada, o tensor extra-tensão da solução polimérica pode ser escrito como a soma de uma contribuição do solvente Newtoniano e do polímero,

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p = \eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \boldsymbol{\tau}_p. \quad (2-31)$$

Aqui, η_s é a viscosidade do solvente e $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T$ é o tensor taxa de deformação.

A forma de Kramers para a contribuição do polímero na ausência de forças externas é:

$$\boldsymbol{\tau}_p = n \langle \mathbf{Q}\mathbf{F} \rangle - n \langle \mathbf{Q}\mathbf{F} \rangle_{eq}, \quad (2-32)$$

em que n é o número de moléculas poliméricas por unidade de volume. A convenção de sinais adotada aqui é simétrica à convenção adotada em Bird *et al.* [3].

A forma completa do tensor extra-tensão é definida pela lei que prescreve a força na mola dos halteres elásticos.

Halteres Hookeanos

No primeiro modelo escolhido supõe-se uma mola “Hookeana”, isto é, a força na mola sendo proporcional à separação das massas,

$$\mathbf{F} = H\mathbf{Q}, \quad (2-33)$$

em que H é a constante da mola. Introduzindo essa lei de força da mola na expressão de Kramers (eq.(2-32)) e observando a eq.(2-30), obtém-se

$$\boldsymbol{\tau}_p = nH\langle\mathbf{Q}\mathbf{Q}\rangle - nkT\mathbf{I}. \quad (2-34)$$

Eliminando $\langle\mathbf{Q}\mathbf{Q}\rangle$ entre a eq.(2-34) e a eq.(2-29), obtém-se para o tensor das tensões poliméricas

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H\boldsymbol{\tau}_{p(1)} = nkT\lambda_H\dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (2-35)$$

Aqui, $\lambda_H = \zeta/4H$ é a constante de tempo para os halteres Hookeanos e o tensor taxa de deformação surge do fato de que $\mathbf{I}_{(1)} = \dot{\boldsymbol{\gamma}}$. A equação (2-35) também é chamada de modelo “Oldroyd-B”.

A suspensão de halteres Hookeanos fornece funções materiais de escoamentos de cisalhamento em regime permanente que são independentes da taxa de cisalhamento, e também uma viscosidade extensional em regime permanente que cresce infinitamente a taxas de extensão finitas; este comportamento improvável resulta devido ao modelo de halteres Hookeanos permitir uma extensão infinita (ver apêndice A).

Halteres não-Hookeanos

Uma relação linear (Hookeana) de força na mola é realística apenas para pequenas deformações e não impõe nenhum limite à extensão a qual os halteres podem sofrer. Uma abordagem que corrige este comportamento não físico e que parece ter um papel importante em fenômenos reológicos não lineares é a idéia de uma extensibilidade finita. Modelos de halteres com forças na mola não lineares e finitamente extensíveis (finite extensible non-linear elastic - FENE) são largamente usados em cálculos numéricos de escoamentos.

A lei empírica original de força não linear finitamente extensível foi proposta para halteres primeiramente por Warner [45]:

$$\mathbf{F} = \frac{HQ}{1 - (Q/Q_0)^2}, \quad (2-36)$$

em que Q_0 é o máximo comprimento possível da mola. Ela exhibe, para pequenas extensões, o comportamento linear esperado e um comprimento finito Q_0 no limite de força infinita.

Para os modelos de halteres do tipo FENE pode-se definir duas constantes de tempo. A primeira, $\lambda_H = \zeta/4H$, é igual à usada nos halteres Hookeanos e a segunda, $\lambda_Q = \zeta Q_0^2/12kT$, é o análogo àquela para um haltere rígido. Usualmente trabalha-se com a primeira constante de tempo e com o parâmetro adimensional de extensibilidade finita $b = 3\lambda_Q/\lambda_H = HQ_0^2/kT$. Note que se b cresce infinitamente, recupera-se a fórmula para os halteres Hookeanos.

A não linearidade da força na mola não permite a obtenção de uma equação constitutiva fechada para o tensor das tensões poliméricas. Muitas variações desse modelo têm sido propostas para superar esta dificuldade. Um modelo de haltere mais tratável analiticamente e que leva a uma equação constitutiva fechada pode ser obtido pela substituição do fator não linear dependente da configuração na força de mola finitamente extensível por um termo médio auto-consistente. A aproximação FENE-P (de Peterlin, que

introduziu a idéia)

$$\mathbf{F} = \frac{H\mathbf{Q}}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} \quad (2-37)$$

foi usada primeiramente por Bird [1]. Seu comportamento é semelhante ao modelo FENE em escoamento de cisalhamento e escoamento extensional, no entanto possibilita contornar as dificuldades operacionais do modelo FENE.

Substituindo a eq.(2-37) na eq.(2-32) e notando que a eq.(2-30) também se aplica ao modelo FENE-P, obtém-se

$$\boldsymbol{\tau}_p = \frac{nH\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} - nkT\mathbf{I}, \quad (2-38)$$

ou

$$\boldsymbol{\tau}_p = nHZ\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - nkT\mathbf{I}, \quad (2-39)$$

em que

$$Z = \frac{1}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle}. \quad (2-40)$$

Tomando o traço da eq.(2-39) e usando a eq.(2-40), pode-se escrever $Z = Z(\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p)$ para o modelo FENE-P:

$$Z = 1 + \frac{3}{b} \left[1 + \frac{\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p}{3nkT} \right]. \quad (2-41)$$

Eliminando-se $\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle$ entre a eq.(2-39) e a eq.(2-29), obtém-se uma equação constitutiva aproximada para o modelo FENE-P:

$$Z\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H\boldsymbol{\tau}_{p(1)} - \lambda_H[\boldsymbol{\tau}_p + nkT\mathbf{I}] \frac{D}{Dt}(\ln Z) = nkT\lambda_H\dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (2-42)$$

Como Z depende de $\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p$, esta equação é não linear na tensão. Quando b cresce infinitamente, Z aproxima-se da unidade, e recupera-se o modelo de Oldroyd-B. As funções materiais para escoamento de cisalhamento em regime permanente no modelo FENE-P mostram alguma dependência com a taxa de cisalhamento, em contraste com as funções materiais independentes da taxa de cisalhamento do modelo de Oldroyd-B. Logo, o modelo FENE-P é uma melhor escolha para simulações numéricas de líquidos viscoelásticos

cuja viscosidade decresce com a taxa de cisalhamento (shear-thinning viscoelastic liquids).

Uma equação semelhante à FENE-P para a evolução dos halteres foi proposta por Chilcott e Rallison [9] (o conhecido modelo FENE-CR) para o cálculo de escoamentos complexos. O modelo ainda usa a aproximação de Peterlin, mas elimina a dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento em regime permanente a fim de descrever fluidos de Boger.

Chilcott e Rallison introduziram um coeficiente de difusão arbitrário não constante na “equação de difusão” (eq.(2-25)) para obter uma viscosidade constante em escoamentos de cisalhamento (veja também Herrchen e Ottinger [21]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} = & - \left([\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{Q}] \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \psi \right) + \frac{2}{\zeta} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \mathbf{F} \psi \right) + \\ & + \frac{2kT}{\zeta} \frac{1}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \psi \right). \end{aligned} \quad (2-43)$$

Aplicando o mesmo procedimento de médias feito para o modelo FENE-P, a equação de transporte para $\mathbf{Q}\mathbf{Q}$ no modelo FENE-CR fica

$$\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle_{(1)} = \frac{4kT}{\zeta} Z\mathbf{I} - \frac{4}{\zeta} \langle \mathbf{Q}\mathbf{F} \rangle, \quad (2-44)$$

em que Z é dada pela eq.(2-40).

No equilíbrio:

$$\langle \mathbf{Q}\mathbf{F} \rangle_{eq} = kT Z\mathbf{I}. \quad (2-45)$$

Substituindo a lei de força na mola do modelo FENE-P (eq.(2-37)) na eq.(2-32) e observando que para o modelo FENE-CR a eq.(2-45) se aplica, obtém-se

$$\boldsymbol{\tau}_p = nHZ \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - nkT Z\mathbf{I}. \quad (2-46)$$

Tomando o traço da eq.(2-46) e usando a eq.(2-40), pode-se escrever

$Z = Z(\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p)$ para o modelo FENE-CR:

$$Z = \frac{1 + (\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p/nkTb)}{1 - (3/b)}. \quad (2-47)$$

Eliminando-se $\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle$ entre a eq.(2-46) e a eq.(2-44), obtém-se uma equação constitutiva aproximada para o modelo FENE-CR:

$$Z\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H\boldsymbol{\tau}_{p(1)} - \lambda_H\boldsymbol{\tau}_p \frac{D}{Dt}(\ln Z) = ZnkT\lambda_H\dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (2-48)$$

Novamente, quando se permite que b cresça infinitamente recupera-se a fórmula para os halteres Hookeanos.

Sumário dos modelos de halteres elásticos

Identificando o produto $nkT\lambda_H$ com a contribuição polimérica para a viscosidade de cisalhamento, η_p , apresenta-se o sumário da contribuição polimérica para a tensão dos modelos de halteres elásticos a serem utilizados nesta investigação:

- modelo Oldroyd-B

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H\boldsymbol{\tau}_{p(1)} = \eta_p\dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (2-49)$$

- modelo FENE-P

$$Z\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H\boldsymbol{\tau}_{p(1)} - \lambda_H \left[\boldsymbol{\tau}_p + \left(\frac{\eta_p}{\lambda_H} \right) \mathbf{I} \right] \frac{D}{Dt}(\ln Z) = \eta_p\dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (2-50)$$

em que

$$Z = 1 + \frac{3}{b} \left[1 + \left(\frac{\lambda_H}{3\eta_p} \right) \text{tr } \boldsymbol{\tau}_p \right]. \quad (2-51)$$

- modelo FENE-CR

$$Z\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H\boldsymbol{\tau}_{p(1)} - \lambda_H\boldsymbol{\tau}_p \frac{D}{Dt}(\ln Z) = Z\eta_p\dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (2-52)$$

em que

$$Z = \frac{1 + (\lambda_H/b\eta_p)\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p}{1 - (3/b)}. \quad (2-53)$$

2.2.3 Condições de contorno

Apresenta-se na fig.(2.5) um diagrama esquemático do problema do deslocamento de fluidos, bem como dos contornos sobre os quais se aplicam condições de contorno específicas.

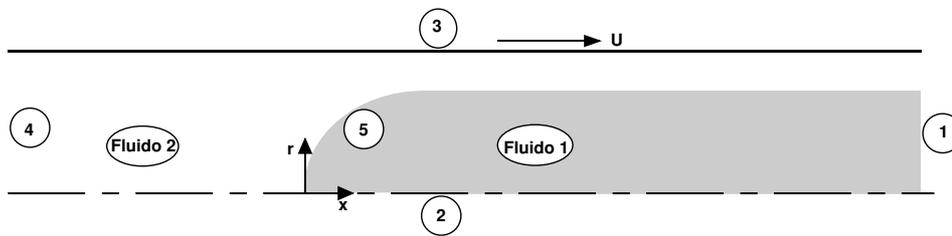


Figura 2.5: Representação das condições de contorno físicas do problema.

O escoamento é perturbado pela ação da interface entre os dois fluidos, e estas perturbações atuam localmente em sua vizinhança. Logo, supondo que os contornos (1) e (4) estão suficientemente distantes da interface, considera-se nos mesmos um escoamento desenvolvido. Pode-se impor uma pressão no contorno (4), no entanto, deve-se permitir que a pressão seja livre para se ajustar ao equilíbrio de forças de tensão superficial existentes na superfície livre do contorno (1). O contorno (2) é modelado como uma linha de simetria, portanto, o mesmo é tratado como uma linha de corrente onde a tensão é nula. Aplicam-se à parede, contorno (3), as condições clássicas de impermeabilidade e não deslizamento. O contorno (5) representa a interface entre dois meios contínuos. A teoria sobre escoamentos com superfície livre prescreve para a interface duas condições de contorno. A condição de contorno cinemática, que afirma que não há fluxo de massa através da interface entre os meios, e a condição de contorno dinâmica, que

prescreve um salto de tensão entre as fases a fim de equilibrar a tensão superficial existente na interface.

Em notação tensorial:

(1) \Rightarrow Escoamento desenvolvido com pressão livre

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_k = 0 \quad (2-54)$$

(2) \Rightarrow Simetria axial

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_k = 0, \quad \mathbf{t} \cdot (\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{n}) = 0 \quad (2-55)$$

(3) \Rightarrow Impermeabilidade e não deslizamento com velocidade prescrita na parede

$$\mathbf{u}_2 = U \mathbf{e}_x \quad (2-56)$$

(4) \Rightarrow Escoamento desenvolvido com pressão conhecida

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_2 = 0 \quad , \quad p_2 = P_0 \quad (2-57)$$

(5) \Rightarrow Condição cinemática e condição dinâmica na interface (na ausência de gradientes de tensão)

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) = 0 \quad , \quad \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) = \frac{\sigma}{R_m} \mathbf{n} \quad (2-58)$$

Nas equações anteriores \mathbf{n} e \mathbf{t} são, respectivamente, o vetor normal e o vetor tangente à linha de simetria, \mathbf{T} é o tensor das tensões, \mathbf{e}_x é o vetor unitário na direção axial, U é a velocidade prescrita na parede do tubo, P_0 é a pressão imposta no contorno (4), σ é a tensão superficial na interface e R_m é o raio médio de curvatura entre as fases fluidas.

Em coordenadas cilíndricas:

(1) e (4) \Rightarrow Escoamento desenvolvido

• Componente axial

$$n_r \frac{\partial u_k}{\partial r} + n_x \frac{\partial u_k}{\partial x} = 0 \quad (2-59)$$

- Componente radial

$$n_r \frac{\partial v_k}{\partial r} + n_x \frac{\partial v_k}{\partial x} = 0 \quad (2-60)$$

(2) \Rightarrow Simetria axial

- Impermeabilidade

$$n_r v_k + n_x u_k = 0 \quad (2-61)$$

- Tensão tangencial nula

$$t_r (T_{(rr)_k} n_r + T_{(xr)_k} n_x) + t_x (T_{(rx)_k} n_r + T_{(xx)_k} n_x) = 0 \quad (2-62)$$

(5) \Rightarrow Condições de contorno na interface

- Condição cinemática

$$n_r (v_1 - v_2) + n_x (u_1 - u_2) = 0 \quad (2-63)$$

- Condição dinâmica na direção axial

$$n_r (T_{(xr)_1} - T_{(xr)_2}) + n_x (T_{(xx)_1} - T_{(xx)_2}) = \frac{\sigma}{R_m} n_x \quad (2-64)$$

- Condição dinâmica na direção radial

$$n_r (T_{(rr)_1} - T_{(rr)_2}) + n_x (T_{(xr)_1} - T_{(xr)_2}) = \frac{\sigma}{R_m} n_r \quad (2-65)$$

Nas equações anteriores n_x e n_r são, respectivamente, as componentes axial e radial do vetor normal, t_x e t_r são, respectivamente, as componentes axial e radial do vetor tangente e T_{rr} , T_{rx} , T_{xr} , T_{xx} são as componentes do tensor das tensões. Os índices 1 e 2 indicam as diferentes fases fluidas.

2.3

Modelagem computacional do problema de deslocamento de líquidos em um tubo (caso geral)

2.3.1

Solução de problemas com superfícies livres

Como visto no capítulo sobre a formulação matemática, a solução do problema de escoamentos com superfície livre, em particular do deslocamento de fluidos em tubos, reside na solução de equações diferenciais tais como a equação de conservação da massa e a equação de conservação de quantidade de movimento linear. Como os fluidos de interesse apresentam comportamento viscoelástico, escolheu-se um modelo constitutivo de equação diferencial para determinar o tensor extra tensão. Além desse sistema de equações, o problema apresenta uma complicação adicional que é o fato de não se conhecer de antemão a forma e a posição da interface entre os fluidos, tornando-se as mesmas outras variáveis do problema. Provavelmente devido à dificuldade apresentada por tal sistema de equações, não se encontrou na literatura pesquisada soluções analíticas satisfatórias para o presente problema.

Escolheu-se resolver o problema numericamente utilizando a técnica de elementos finitos.

2.3.2

Natureza do problema em elementos finitos

Discretização espacial

O domínio espacial é discretizado pela subdivisão do meio contínuo em elementos de tamanhos e formas arbitrárias. Como qualquer estrutura poligonal com lados retilíneos ou curvos pode finalmente ser reduzida a figuras quadriláteras, escolheu-se esta como sendo a base para a subdivisão

espacial. A única restrição é que os elementos não podem se sobrepor e devem cobrir completamente o domínio computacional. Define-se, aqui, um número de nove pontos em cada elemento, oito pontos posicionados ao longo dos lados e um ponto no centro do elemento (elemento bi-quadrático). Estes *nós* são os pontos onde os valores numéricos das funções incógnitas, e eventualmente de suas derivadas, são determinados. O número total de incógnitas nos nós, valores das funções e eventualmente valores de suas derivadas compõem os *graus de liberdade* do problema numérico. Em seguida, o domínio físico (de topologia complexa) deve ser mapeado em um domínio computacional (de topologia simples) a fim de que se processem os cálculos dos graus de liberdade do problema.

Funções de interpolação

As variáveis de campo são aproximadas por combinações lineares de *funções base* conhecidas. Se \tilde{u} é uma solução aproximada de $u(\vec{x})$, escreve-se uma expansão em série da forma

$$\tilde{u}(\vec{x}) = \sum u_i N_i(\vec{x})$$

onde a soma se estende por todos os nós i . Portanto, anexa-se uma função de interpolação a cada grau de liberdade. Escolheu-se para a formulação presente a *interpolação isoparamétrica* em cada elemento. A contribuição global é obtida por uma montagem conveniente das contribuições locais de todos os elementos.

Discretização das equações - formulação integral

O método dos elementos finitos apresenta como característica essencial o requerimento de uma formulação integral do problema físico equivalente ao campo de equações a ser resolvido. Dentre as possibilidades que se apresentam, escolhe-se aqui a aplicação do *método dos resíduos ponderados*, ou *formulação fraca* do problema. O método dos resíduos ponderados é a

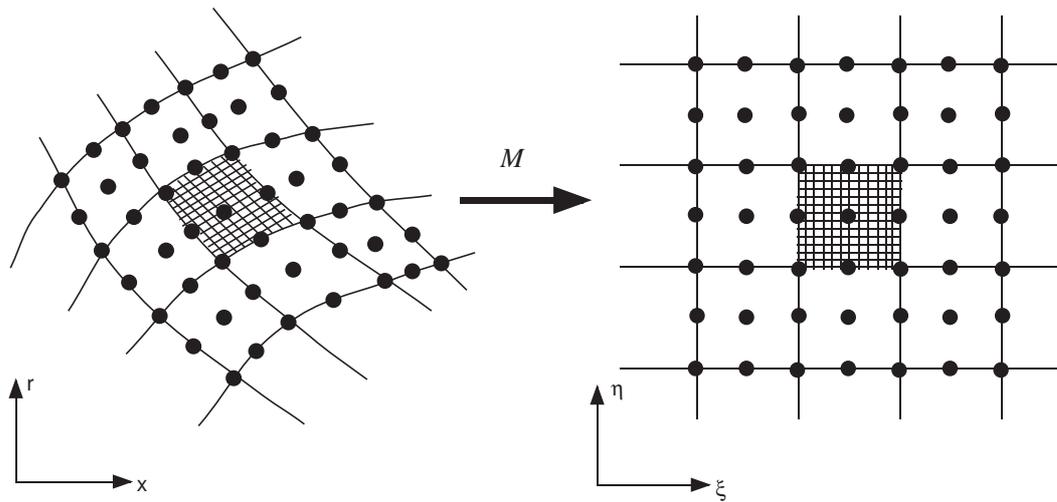


Figura 2.6: Mapeamento do domínio físico curvilíneo $\mathbf{x}(x, r)$ em um domínio numérico retangular $\boldsymbol{\xi}(\xi, \eta)$.

técnica mais geral que permite definir em todos os casos uma formulação integral equivalente.

2.3.3 Mapeamento do domínio físico/computacional

Como mencionado, em um problema de superfície livre o domínio de integração em cada fase líquida é desconhecido. Um modo de resolver este problema é reescrevê-lo em um domínio de referência fixo e utilizar técnicas usuais para problemas de valores de contorno. Para fazer esta transformação é necessário definir uma função de mapeamento entre o domínio físico, desconhecido, e o domínio de referência, fixo (ver fig.(2.6)).

O mapeamento utilizado na transformação de coordenadas faz parte da solução do problema. A função \mathcal{M} , que relaciona o sistema de coordenadas físicas com o sistema de coordenadas fixas, é desconhecida. Existem várias maneiras de definir este mapeamento. Como o cálculo de \mathbf{x} , vetor posição do sistema de coordenadas físicas, corresponde ao cálculo das coordenadas dos pontos nodais da malha, costuma-se denominar as equações que descrevem esse mapeamento de equações de geração de malha.

Para problemas de contorno fixo, a geração de malha é um pré-processamento. No entanto, para problemas de superfície livre, a equação

de malha é acoplada ao problema físico através da condição de contorno nas superfícies livres.

Após aplicar o mapeamento, o problema é resolvido no domínio de referência. Para escrever as equações que governam o problema no domínio de referência, as derivadas em relação às coordenadas no domínio físico (x, r) devem ser representadas por derivadas em relação às coordenadas no domínio de referência (ξ, η) :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{|\mathbf{F}|} \left(\frac{\partial r}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \quad (2-66)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{|\mathbf{F}|} \left(-\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \quad (2-67)$$

Nas equações anteriores,

$$|\mathbf{F}| = \frac{\partial r}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} - \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \quad (2-68)$$

é o determinante da matriz de transformação de coordenadas.

Resta definir as equações que descrevem o mapeamento entre os domínios físico e de referência, ou seja, as equações de geração de malha. Uma possibilidade, que se tem mostrado satisfatória para solução de problemas com superfícies livres, é utilizar equações do tipo difusiva:

$$\nabla \cdot [D_\xi \nabla \xi] = 0 \quad (2-69)$$

$$\nabla \cdot [D_\eta \nabla \eta] = 0 \quad (2-70)$$

D_ξ e D_η são coeficientes de difusão de potenciais de ξ e η . Eles controlam o espaçamento entre linhas de ξ -constante e η -constante.

As equações (2-69) e (2-70) descrevem o inverso do mapeamento $\mathcal{M}: (\xi, \eta) \rightarrow (x, r)$. Para determinar o mapeamento \mathcal{M} , estas equações também são transformadas para o domínio de referência.

2.3.4

Formulação do problema em elementos finitos

No método dos resíduos ponderados, procura-se uma solução aproximada do problema que pertença a um espaço de funções de dimensão finita. Desta forma, os campos desconhecidos são escritos como combinações lineares de funções base:

$$u = \sum_{i=1}^N U_k^i \phi_i, v = \sum_{i=1}^N V_k^i \phi_i, p = \sum_{i=1}^{N_p} P_k^i \chi_i,$$

$$x = \sum_{i=1}^N X_k^i \phi_i, r = \sum_{i=1}^N R_k^i \phi_i. \quad (2-71)$$

Se o tipo de subespaço onde a solução aproximada é procurada for escolhido apropriadamente, a precisão da solução melhora com o aumento da dimensão deste subespaço. No método de elementos finitos, as funções base ϕ_i 's e χ_i 's são não nulas apenas em uma pequena porção do domínio. As funções ϕ_i 's usadas para descrever o campo de velocidade e posição são contínuas e biquadráticas na pequena região do domínio onde são não nulas. As funções χ_i 's usadas para descrever o campo de pressão são descontínuas e lineares por partes. Uma vez escolhido o espaço, isto é, as funções ϕ_i 's e χ_i 's, as incógnitas do problema passam a ser os coeficientes U_k^i , V_k^i , P_k^i , X_k^i e R_k^i da expansão de cada campo.

O método de Galerkin é um caso particular da técnica conhecida como método dos resíduos ponderados. O resíduo ponderado de uma equação diferencial é obtido multiplicando-se a função resíduo por uma função teste e integrando o produto ao longo do domínio. No caso do método de Galerkin, o resíduo ponderado deve ser ortogonal ao mesmo subespaço finito do espaço de funções de dimensão infinita, onde a solução aproximada é definida. As funções teste podem ser escritas como uma combinação linear das funções que formam a base do subespaço escolhido, isto é, ϕ_i 's e χ_i 's. Como as funções base são não nulas apenas em uma pequena região do domínio, elas formam um subespaço quase ortogonal, o que representa uma grande vantagem nos cálculos dos coeficientes da expansão.

Formulação fraca das equações

Calculam-se as integrais seguintes em cada elemento pelo método da *Quadratura Gaussiana* com três pontos em cada direção.

Conservação de massa

O vetor resíduo ponderado da equação de conservação de massa é representado por:

$$\mathbf{R}_c = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}_k) \chi r d\Omega \quad (2-72)$$

em que χ é a função peso da equação de conservação de massa e Ω é utilizado para representar as integrais no volume. Em coordenadas cilíndricas:

- Resíduo da equação de conservação de massa

$$R_c^i = \int_{\Omega} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_k) + \frac{\partial u_k}{\partial x} \right] \chi_i r d\Omega \quad (2-73)$$

em que χ_i formam a base do espaço de funções peso da equação de conservação de massa.

Conservação de quantidade de movimento linear

O vetor dos resíduos ponderados da equação de conservação de quantidade de movimento linear é representado por:

$$\mathbf{R}_m = \int_{\Omega} [\rho_k (\mathbf{u}_k \cdot \nabla \mathbf{u}_k) \cdot \mathcal{W} + \text{tr}(\mathbf{T}_k \cdot \nabla \mathcal{W}) - \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathcal{W}] r d\Omega - \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_k) \cdot \mathcal{W} r d\Gamma \quad (2-74)$$

em que \mathcal{W} é o vetor função peso da equação de conservação de quantidade de movimento linear, Ω é utilizado para representar as integrais no volume e Γ para representar as integrais no contorno. Em coordenadas cilíndricas:

- Resíduos da equação de conservação de quantidade de movimento linear axial

$$R_{mx}^i = \int_{\Omega} \left[\rho_k \phi_i \left(u_k \frac{\partial u_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial u_k}{\partial r} \right) + \frac{\partial \phi_i}{\partial x} T_{(xx)_k} + \frac{\partial \phi_i}{\partial r} T_{(xr)_k} \right] r d\Omega - \int_{\Gamma} f_x \phi_i r d\Gamma \quad (2-75)$$

- Resíduos da equação de conservação de quantidade de movimento linear radial

$$R_{mr}^i = \int_{\Omega} \left[\rho_k \phi_i \left(u_k \frac{\partial v_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial v_k}{\partial r} \right) + \frac{\partial \phi_i}{\partial x} T_{(xr)_k} + \frac{\partial \phi_i}{\partial r} T_{(rr)_k} + \frac{\phi_i}{r} T_{(\theta\theta)_k} - \rho_k g \phi_i \right] r d\Omega - \int_{\Gamma} f_r \phi_i r d\Gamma \quad (2-76)$$

em que f_x é f_r são os componentes de força nos contornos nas direções axial e radial, respectivamente, e ϕ_i formam a base do espaço de funções peso das equações de conservação de quantidade de movimento linear.

Geração da malha

Resolvem-se as equações de geração de malha da mesma forma que são resolvidas as equações de conservação, ou seja, usando a técnica de resíduos ponderados. Apresentam-se a seguir os resíduos dos componentes elementares da equação de malha.

- Componente elementar ξ

$$R_{\xi}^i = - \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial r} \frac{\partial \xi}{\partial r} \right) d\Omega + \int_{\Gamma} (\nabla \xi \cdot n) \phi_i d\Gamma \quad (2-77)$$

- Componente elementar η

$$R_{\eta}^i = - \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial r} \frac{\partial \eta}{\partial r} \right) d\Omega + \int_{\Gamma} (\nabla \eta \cdot n) \phi_i d\Gamma \quad (2-78)$$

2.3.5

Solução do sistema não linear pelo método de Newton

Tem-se agora cinco conjuntos de incógnitas, U_k^i , V_k^i , P_k^i , X_k^i , R_k^i e cinco conjuntos de equações, R_{mx}^i , R_{mr}^i , R_c^i , R_ξ^i , R_η^i . O sistema de equações resultante é não linear, devido aos termos convectivos e à função de mapeamento. Este sistema é resolvido pelo método de Newton. Para isso, deve-se calcular a sensibilidade de cada equação em relação a cada incógnita, isto é, deve-se calcular a matriz Jacobiana $J_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial C_j}$, em que C_j representa os coeficientes de ajuste de cada variável do problema.

O método de Newton requer a solução de um sistema linear a cada iteração. Este sistema é resolvido através do método de Eliminação Gaussiana. Ainda, por se tratar de um sistema esparso, o algoritmo de solução frontal é utilizado. As integrais em cada elemento são resolvidas pela Quadratura Gaussiana com três pontos em cada direção.

Apresentam-se, no apêndice B, os coeficientes da matriz Jacobiana relativos às equações de conservação de massa, de quantidade de movimento linear e de geração de malha.

2.4

Modelagem computacional do problema de deslocamento de líquidos em um tubo (caso presente)

Aplicamos uma formulação em elementos finitos para estudar o deslocamento de líquidos viscoelásticos em tubos capilares. O método de solução implementado é a formulação DEVSS-G/SUPG proposta por Guenette e Fortin [20], e Brooks e Hughes [8].

2.4.1

Parametrização da superfície livre

As equações diferenciais relevantes são postas em um domínio desconhecido; a posição da superfície livre do líquido é parte da solução. Uma

forma simples de resolver este tipo de problema é usar uma iteração de Picard, isto é, resolver o escoamento e a posição do domínio separadamente. Este procedimento não é muito eficiente e na maioria dos casos a iteração não converge. Para calcular a solução de um problema de superfície livre de maneira mais eficiente, o conjunto de equações diferenciais postas no domínio físico desconhecido deve ser transformado em um conjunto equivalente definido em um domínio de referência conhecido, normalmente chamado de domínio computacional. Esta transformação é feita por um mapeamento $\mathbf{x} = \mathcal{M}(\boldsymbol{\xi})$, que conecta os dois domínios. O inverso do mapeamento que minimiza o funcional é governado por equações diferenciais elípticas idênticas às encontradas em transportes difusivos com coeficientes de difusão variáveis. As coordenadas do domínio de referência satisfazem

$$\nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi}) = 0, \quad (2-79)$$

em que \mathbf{D} é o tensor coeficiente de difusão e $\boldsymbol{\xi}$ são as coordenadas do domínio de referência.

Para resolver estas equações diferenciais parciais de segunda ordem são necessárias algumas condições de contorno. Ao longo das paredes sólidas e de planos de entrada e de saída, o contorno é localizado pela imposição de uma relação entre as coordenadas físicas x e r da equação que descreve a forma do contorno, e funções de distribuição são utilizadas para distribuir os pontos ao longo dos contornos. O contorno livre (interface gás-líquido) é localizado pela imposição da condição cinemática (eq.(2-4)). A versão discreta das equações de mapeamento são geralmente denominadas de equações de geração de malha.

2.4.2 Funções de interpolação

Os campos desconhecidos são escritos como uma combinação linear de funções base como polinômios de Lagrange. Assim, o vetor velocidade \mathbf{u} , a pressão p , o vetor posição nodal \mathbf{x} , o tensor gradiente de velocidade

interpolado \mathbf{g} e o tensor das tensões poliméricas $\boldsymbol{\tau}_p$ são aproximados por, respectivamente:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \sum_{j=1}^9 (\mathbf{U}_j \phi_j), p = \sum_{j=1}^3 (P_j \chi_j), \mathbf{x} = \sum_{j=1}^9 (\mathbf{X}_j \phi_j), \\ \mathbf{g} &= \sum_{j=1}^4 (\mathbf{G}_j \psi_j), \boldsymbol{\tau}_p = \sum_{j=1}^4 (\mathbf{I}_{p_j} \psi_j). \end{aligned} \quad (2-80)$$

Aqui, \mathbf{U}_j , P_j , \mathbf{X}_j , \mathbf{G}_j , \mathbf{I}_{p_j} são os coeficientes das funções base, e representam as incógnitas do problema discretizado. As funções base $\phi_j(\xi, \eta)$ são biquadráticas, $\chi_j(\xi, \eta)$ são lineares descontínuas e $\psi_j(\xi, \eta)$ são bilineares, todas escolhidas para satisfazer a condição de *Babüska – Brezzi*.

2.4.3

Formulação fraca das equações governantes no domínio de referência

As equações de conservação de massa, conservação de quantidade de movimento linear, gradiente de velocidade interpolado e geração de malha são resolvidas usando o método de Galerkin. Por sua natureza hiperbólica, todas as três equações constitutivas diferenciais são resolvidas usando o método SUPG (Streamline Upwinding Petrov-Galerkin). A forma fraca das equações governantes é, em notação tensorial:

- Conservação de massa

$$R_c = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \chi J d\Omega \quad (2-81)$$

- Conservação de quantidade de movimento linear

$$R_m = \int_{\Omega} \text{tr}(\mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{w}) J d\Omega - \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{w} J d\Gamma \quad (2-82)$$

- Gradiente de velocidade interpolado

$$R_g = \int_{\Omega} (\mathbf{g} - \nabla \mathbf{u} + \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}}{\text{tr} \mathbf{I}} \mathbf{I}) : \boldsymbol{\psi} J d\Omega \quad (2-83)$$

- Geração de malha

$$R_X = - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{w} : \mathbf{D} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi}) J d\Omega + \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{w} d\Gamma \quad (2-84)$$

- Modelo Oldroyd-B

$$R_{\boldsymbol{\tau}_p} = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H \boldsymbol{\tau}_{p(1)} - \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}) : \boldsymbol{\varphi} J d\Omega \quad (2-85)$$

- Modelo FENE-P

$$R_{\boldsymbol{\tau}_p} = \int_{\Omega} \left\{ Z \boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H \boldsymbol{\tau}_{p(1)} - \lambda_H \left[\boldsymbol{\tau}_p + \left(\frac{\eta_p}{\lambda_H} \right) \mathbf{I} \right] \frac{D}{Dt} (\ln Z) - \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}} \right\} : \boldsymbol{\varphi} J d\Omega \quad (2-86)$$

- Modelo FENE-CR

$$R_{\boldsymbol{\tau}_p} = \int_{\Omega} \left\{ Z \boldsymbol{\tau}_p + \lambda_H \boldsymbol{\tau}_{p(1)} - \lambda_H \boldsymbol{\tau}_p \frac{D}{Dt} (\ln Z) - Z \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}} \right\} : \boldsymbol{\varphi} J d\Omega \quad (2-87)$$

Aqui, Ω e Γ denotam o domínio de referência e seu contorno, respectivamente. J é o Jacobiano do mapeamento entre os domínios físico e computacional, χ é a função peso escalar para a equação de conservação de massa, \mathbf{w} é a função peso vetorial para as equações de conservação de quantidade de movimento linear e geração de malha, $\boldsymbol{\psi}$ é a função peso tensorial para o gradiente de velocidade interpolado, $\boldsymbol{\varphi}$ é a função peso tensorial para as equações constitutivas e \mathbf{I} é o tensor identidade.

2.4.4

Solução do problema via iterações de Newton

O sistema de equações não lineares resultante é resolvido pelo método de Newton:

$$\mathbf{J} \cdot \delta \mathbf{c} = -\mathbf{R}(\mathbf{c}), \quad (2-88)$$

$$\mathbf{c}^{k+1} = \mathbf{c}^k + \delta \mathbf{c}. \quad (2-89)$$

Aqui, \mathbf{J} é a matriz Jacobiana contendo as derivadas de todas as equações com relação a todas as incógnitas, \mathbf{c} é o vetor solução contendo todas as incógnitas do problema, $\delta \mathbf{c}$ é o incremento no vetor solução, \mathbf{R} é um vetor de resíduos ponderados e k indica a iteração atual.