

3 Resultados Numéricos

3.1 Topologia do mapeamento

A fig.(3.1) representa o mapeamento entre os domínios no caso de gás deslocando um líquido dentro de um tubo. Divide-se o domínio físico em três regiões, (1), (2) e (3), representadas no lado esquerdo da fig.(3.1). No lado direito da mesma figura encontra-se a representação das regiões no domínio computacional de referência. Resolvem-se as equações de conservação no domínio de referência.

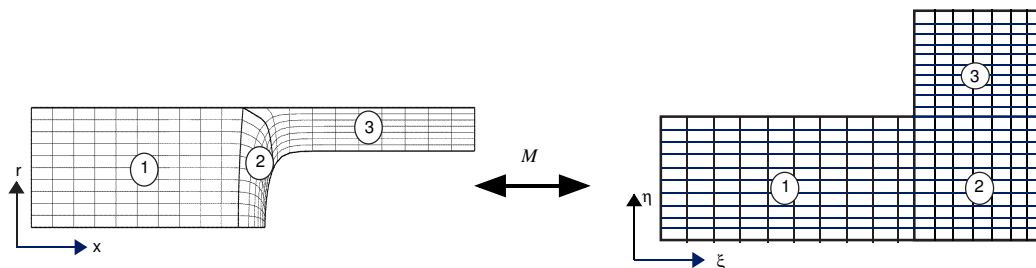


Figura 3.1: Mapeamento do domínio físico curvilíneo $\mathbf{x}(x, r)$ em um domínio numérico retangular $\boldsymbol{\xi}(\xi, \eta)$ para o caso $N_\eta \gg 1$.

3.2 Solução de problemas preliminares

O método numérico utilizado na solução do sistema de equações algébricas resultantes do modelamento do problema é o método de Newton. Sabe-se que, para haver convergência, este método requer uma aproximação inicial próxima da solução do problema.

Para o problema de um gás deslocando um líquido Newtoniano em um tubo capilar, desprezando os efeitos de inércia, resolvem-se três problemas preliminares em seqüência, um como aproximação inicial para o outro, a fim de conseguir o primeiro caso convergido.

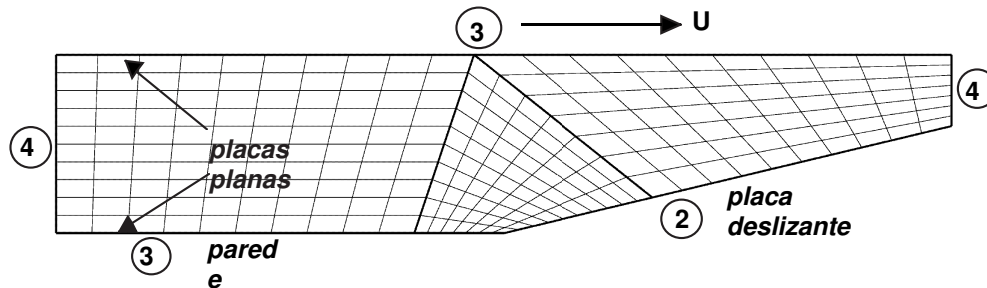


Figura 3.2: Primeiro problema preliminar para solução de gás deslocando líquido Newtoniano.

A fig.(3.2) mostra o diagrama esquemático do primeiro problema preliminar. As condições impostas aos contornos são as seguintes:

1. Escoamento desenvolvido com pressão prescrita (4);
2. Impermeabilidade e velocidade horizontal da placa constante (zero na placa de baixo e U na placa de cima) (3);
3. Impermeabilidade e deslizamento sem atrito (2).

Como neste caso não se permite o deslocamento da malha, o problema converge em uma iteração.

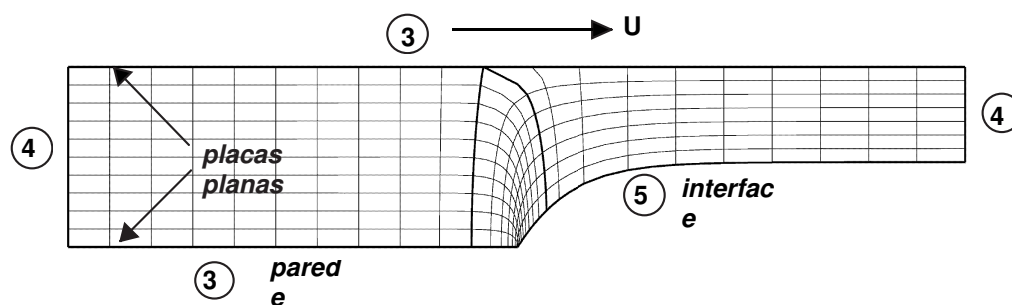


Figura 3.3: Segundo problema preliminar para solução de gás deslocando líquido Newtoniano.

A fig.(3.3) mostra o diagrama esquemático do segundo problema preliminar, que utiliza o primeiro problema preliminar como aproximação inicial. As condições impostas aos contornos são as seguintes:

1. Escoamento desenvolvido com pressão prescrita (4);
2. Impermeabilidade e velocidade horizontal da placa constante (zero na placa de baixo e U na placa de cima) (3);
3. Superfície livre (5).

Neste caso permite-se o deslocamento da malha. Note que apenas a condição no contorno 5 é modificada com relação ao primeiro problema preliminar, permitindo que a interface encontre a posição de equilíbrio para o número de capilaridade em questão.

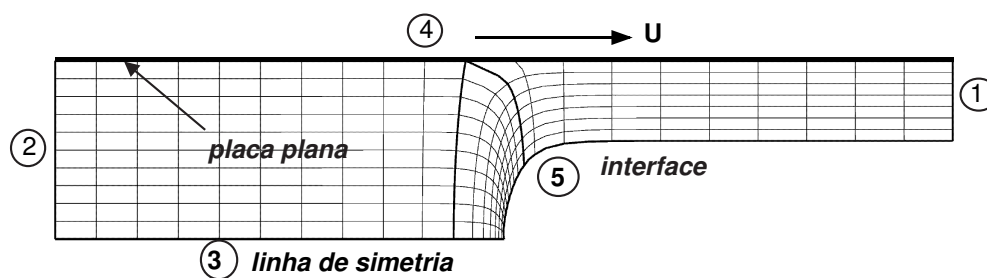


Figura 3.4: Terceiro problema preliminar para solução de gás deslocando líquido Newtoniano.

Finalmente, a fig.(3.4) mostra o diagrama esquemático do terceiro problema preliminar, que utiliza o segundo problema preliminar como aproximação inicial. Agora, as condições impostas aos contornos são as seguintes:

1. Escoamento desenvolvido com pressão livre (1);
2. Escoamento desenvolvido com pressão prescrita (2);
3. Simetria axial (3);
4. Impermeabilidade e velocidade da placa U constante (4);
5. Superfície livre (5).

Neste último caso, além de permitir o deslocamento da malha, apenas a condição no contorno 3 foi modificada com relação ao segundo problema preliminar.

Os três casos anteriores são resolvidos utilizando um sistema de coordenadas retangulares, que por não possuir termos de curvatura facilita a convergência. A única diferença entre o terceiro problema preliminar e o primeiro caso convergido é que este último é resolvido utilizando um sistema de coordenadas cilíndricas, pois o escoamento de interesse se dá através de um tubo.

3.3

Teste de malha

A convergência das soluções numéricas foi testada pela variação da densidade da malha. A soma total dos quadrados das diferenças entre todas as variáveis, isto é, a diferença da norma, entre duas aproximações consecutivas foi adotada como o critério de convergência deste estudo. Observou-se uma diferença da norma em qualquer convergência menor ou igual a 10^{-6} .

Testaram-se três malhas distintas. O número de elementos variou de 452 a 1700. O número de graus de liberdade variou de 13064 a 47432. Esta é uma discretização modesta se comparada com as malhas desenvolvidas na tese de doutorado de A. G.-K. Lee [31] para um problema semelhante. Lee testou malhas cujos números de elementos variavam de 9662 a 19515, e cujos graus de liberdade variavam de 166582 a 336212. As características geométricas dessas malhas são apresentadas na fig.(3.5). A região crítica é a que corresponde à transição sofrida pela interface da região capilar para a região do filme líquido, onde é maior a curvatura da interface. Portanto, esta foi a região mais refinada.

Soares [41], em sua tese de doutorado, usou como critério de avaliação da eficiência das suas malhas a capacidade de reproduzir satisfatoriamente a fração de massa depositada na parede em comparação com os resultados experimentais obtidos por Taylor [42]. Na investigação desta tese verificou-se, porém, que este não é um critério confiável, pois para as malhas testadas não surgiram diferenças significativas nos resultados quando se plotou a

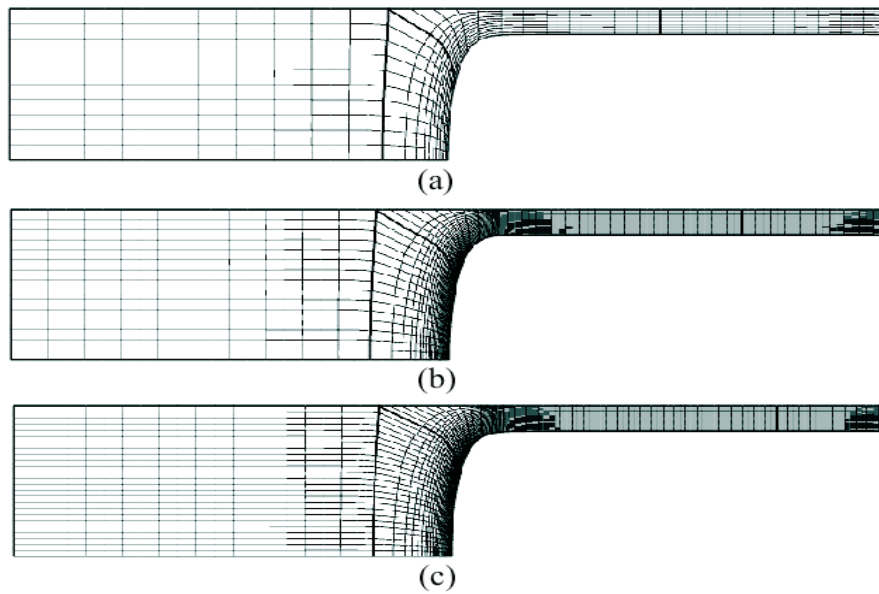


Figura 3.5: Características geométricas das malhas testadas. (a) Malha 1; (b) Malha 2; (c) Malha 3.

fração de massa depositada na parede, m , contra o número de capilaridade, Ca , em comparação com a curva de Taylor correspondente. Acredita-se que, pelo fato da fração de massa ser obtida de um balanço integral da conservação de massa ao redor da interface, ou seja, um valor médio, seja relativamente fácil obter um gráfico do tipo m versus Ca satisfatório, mesmo utilizando malhas pobres na simulação numérica.

Por outro lado, Lee [31] usou como critério de avaliação da eficiência de suas malhas a suavidade das isolinhas de componentes do tensor das tensões poliméricas em um campo de tensões avaliado à frente da interface, pois seus resultados são para gás deslocando um líquido viscoelástico modelado como um fluido de Oldroyd-B. Este critério apresenta vantagens relativamente ao anterior no que se refere à investigação do deslocamento de um fluido que não necessariamente segue uma curva m versus Ca idêntica à obtida por Taylor para um fluido Newtoniano. Entretanto, um critério apoiado na avaliação da suavidade de isolinhas parece eminentemente qualitativo.

Para avaliar a qualidade das malhas neste trabalho, optou-se por comparar as variações dos máximos valores da componente do tensor das tensões poliméricas atuando ao longo da superfície livre, obtido através do modelo Oldroyd-B. Como a superfície livre é o lugar, na região de interesse

do escoamento, onde os níveis de tensão mais importantes são atingidos, e como o modelo Oldroyd-B é aquele que permite atingir os maiores valores de tensão para o mesmo número de Weissenberg, considerou-se este um critério suficientemente bom para o teste de malha.

A fig.(3.6) mostra uma comparação dos máximos valores da componente da tensão polimérica ao longo da superfície livre, τ_{ptt} , obtido com o modelo Oldroyd-B. A fig.(3.6a) mostra o resultado para as três diferentes malhas em baixos valores do número de Weissenberg, enquanto que a fig.(3.6b) mostra o seu correspondente em altos valores do número de Weissenberg.

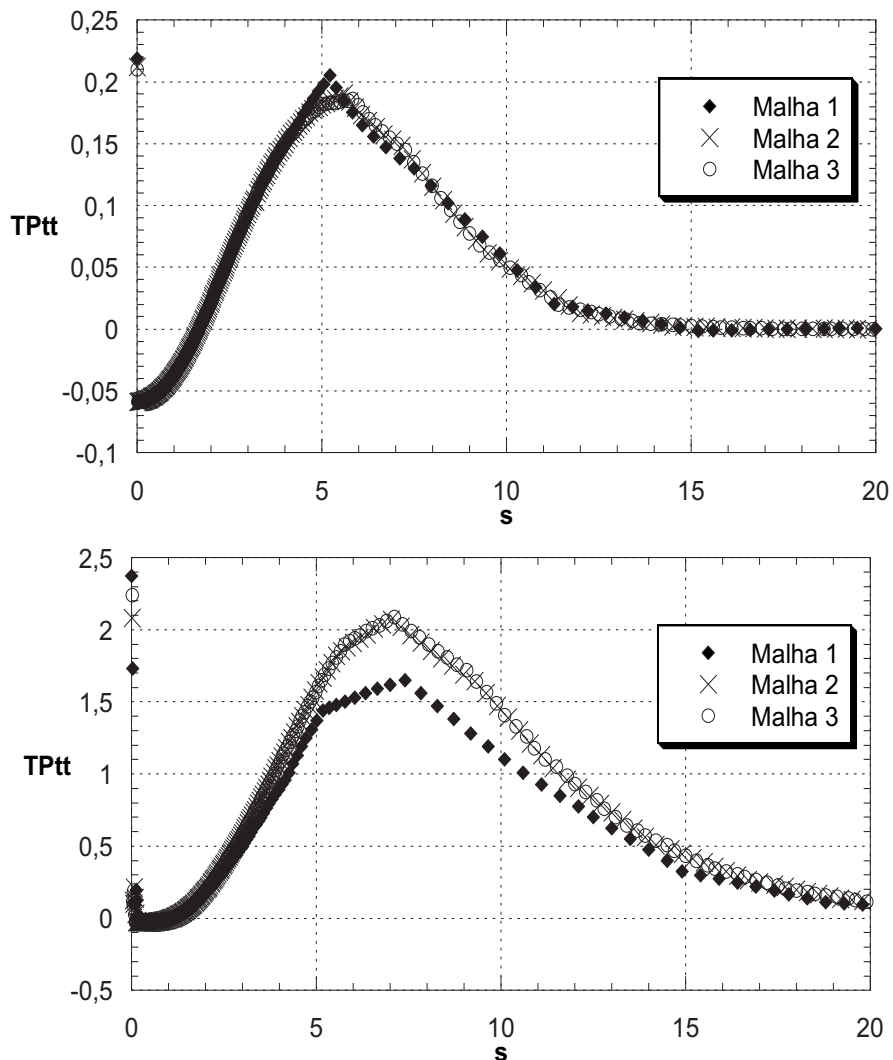


Figura 3.6: Componente da tensão polimérica ao longo da superfície livre obtido com o modelo Oldroyd-B para $Ca = 0,1$. (a) $We = 0,5$; (b) $We = 1,5$.

Aqui, s é a coordenada da superfície livre, uma coordenada que possui valor zero na ponta da bolha e cresce ao longo da superfície livre; é definida por $s = \sqrt{[(\Delta x)^2 + (\Delta r)^2]}$, onde x é a coordenada axial da linha de centro e r é a coordenada radial.

Para baixos valores do número de Weissenberg (fig.(3.6a)), observa-se que os valores da tensão polimérica de esticamento cessam de variar nas malhas 2 e 3. Isto sugere que a densidade da malha 2 é suficiente para tornar a simulação confiável. No entanto, uma análise cuidadosa da fig.(3.6b) permite constatar que há ainda um suave crescimento do valor máximo de τ_{ptt} na malha 3 relativamente à malha 2. O refinamento da malha não pôde ser continuado devido a se ter atingido os limites computacionais disponíveis. Para preservar a confiabilidade dos cálculos em altos números de Weissenberg, e prevendo que maiores refinamentos não trariam grandes avanços, selecionou-se a malha 3 para as simulações numéricas.

3.4 Resultados Newtonianos

Antes de apresentar a análise do deslocamento de líquidos viscoelásticos em tubos capilares, apresentam-se alguns resultados clássicos para líquidos Newtonianos a fim de testar o procedimento de solução, fornecer informações básicas sobre o assunto e ganhar experiência para análises posteriores mais complexas.

A fig.(3.7) mostra a dependência da espessura do filme líquido depositado na parede do tubo com o número de capilaridade. As simulações cobrem uma faixa de número de capilaridade de $0,01 \leq Ca \leq 10$. Além das previsões teóricas obtidas nesta tese, reproduzem-se os resultados experimentais obtidos por Taylor [42]. A concordância entre ambos os resultados é excelente. O resultado obtido por Cox [12], que sugere um valor constante de 0,6 para a fração mássica de revestimento para números de capilaridade acima de 10, também é confirmado. Os resultados experimentais obtidos por Taylor, bem como as previsões teóricas do presente trabalho, mostram

que para uma dada viscosidade e uma dada tensão superficial a espessura de filme líquido depositado na parede é controlada pela velocidade da interface. Portanto, processos que têm por objetivo produzir um filme líquido fino devem ser realizados a baixas vazões.

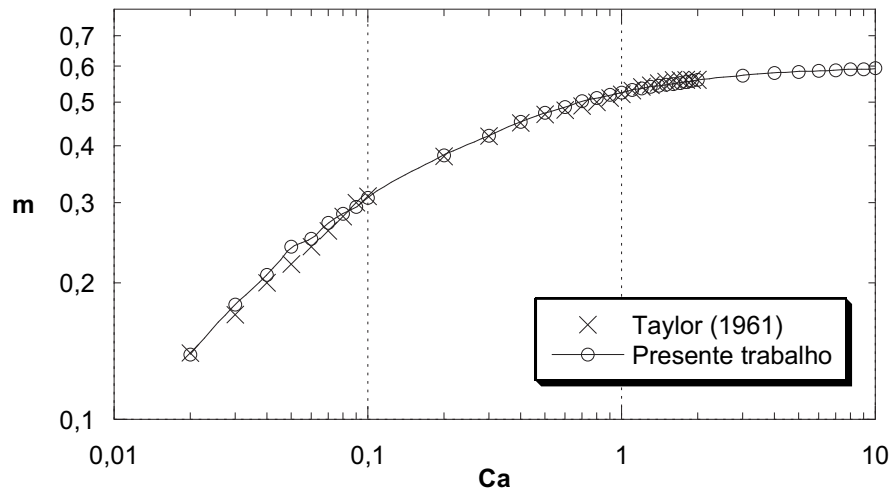


Figura 3.7: Dependência da espessura do filme líquido Newtoniano depositado na parede do tubo com Ca .

Taylor [42] sugeriu três diferentes padrões de linhas de corrente para um líquido viscoso deslocado por um fluido invíscido. Para altos números de capilaridade não haveria reversão do escoamento à frente da bolha; para baixos números de capilaridade haveria uma reversão do escoamento à frente da bolha, com um ponto de estagnação na ponta da bolha e um anel de estagnação acima dela; e para um certo valor intermediário de número de capilaridade haveria reversão do escoamento à frente da bolha, mas agora mostrando dois pontos de estagnação: um na ponta da bolha e o outro um pouco afastado dela, sobre a linha de simetria.

A fim de confirmar as afirmações de Taylor, Goldsmith e Mason [19] e Cox [13] investigaram experimentalmente as linhas de corrente à frente da interface e confirmaram apenas dois dos padrões previstos por Taylor: aqueles para altos e baixos valores do número de capilaridade.

Explorando o caso axissimétrico de um gás deslocando um líquido Newtoniano, Giavedoni e Saita [18], em sua simulação numérica, foram quem primeiro obtiveram o padrão de recirculação intermediário previsto por Taylor. Eles sugerem que uma recirculação com dois pontos de estagnação

localizados sobre a linha de simetria ocorreria para números de capilaridade na faixa de $0,605 \leq Ca \leq 0,690$. Este mesmo padrão de recirculação é recuperado na presente simulação para $Ca = 0,600$. Os três padrões de recirculação são apresentados na fig.(3.8).

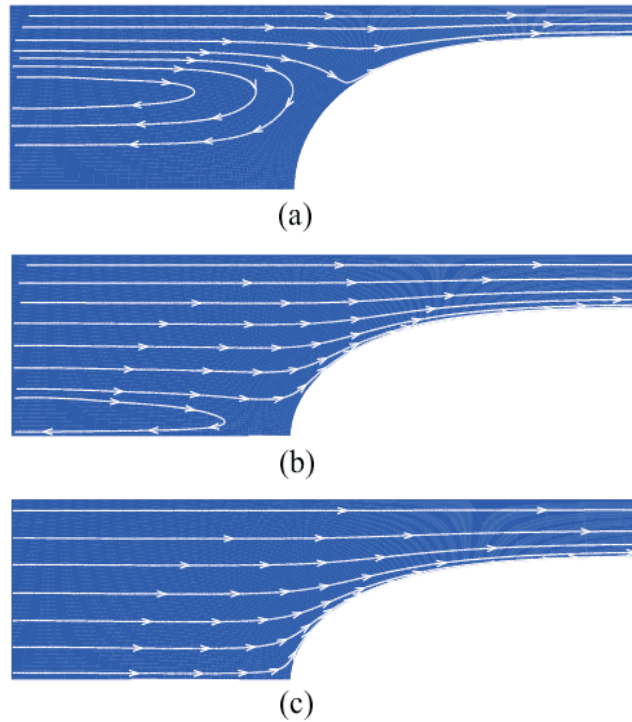


Figura 3.8: Campo de escoamento Newtoniano em função de Ca . Padrões de linhas de corrente. (a) $Ca = 0,1$; (b) $Ca = 0,6$; (c) $Ca = 1$.

3.5 Resultados Viscoelásticos

3.5.1 Efeito da viscoelasticidade na interface

Quando aditivos poliméricos são incorporados a um líquido Newtoniano o balanço de forças na solução inteira é alterado. A característica elástica das moléculas poliméricas mostra-se pelo surgimento de tensões elásticas em regiões de grande esticamento do escoamento, principalmente

sobre a superfície livre. Para alcançar uma nova configuração de equilíbrio a curvatura da superfície livre modifica-se e, conseqüentemente, modifica a quantidade de líquido depositado na parede do capilar.

Primeiramente, examina-se a explicação disponível para a variação na quantidade de líquido depositado na parede. Então, estuda-se um caso representativo da fração de massa de líquidos viscoelásticos depositada e, por inspeção do campo de tensões elásticas correspondente, analisa-se como esta nova configuração de equilíbrio afeta a fração mássica de revestimento.

Discussão do mecanismo de revestimento

Resultados experimentais tanto planares (Bonn *et al.* [5]) quanto axissimétricos (Huzyak e Koelling [27]) para o revestimento por injeção de um gás através de um líquido viscoelástico relatam uma diminuição na espessura do filme líquido com relação ao caso Newtoniano de referência para baixos valores do número de Weissenberg, seguida por um aumento na espessura do filme líquido quando se aumenta o número de Weissenberg. Alguns argumentos físicos foram propostos por pesquisadores anteriores para explicar a variação na espessura de revestimento devida à variação da superfície livre induzida pela elasticidade. A partir de agora revisitam-se particularmente o estudo de Ro e Homsy sobre o fenômeno, e em seguida a investigação realizada posteriormente por Lee *et al.*, por interpretar como sendo as explicações mais interessantes sobre o fenômeno.

Ro e Homsy [39] propuseram um mecanismo para a variação de diminuição seguida de aumento da espessura de revestimento do filme líquido viscoelástico. Em sua análise de perturbação eles encontraram duas forças principais em competição na região de transição do escoamento à frente da bolha para o escoamento sobre a bolha, aqui denominada região de transição do capilar: gradientes de tensão de cisalhamento na direção transversal (no caso presente, na direção do eixo r) e gradientes de tensão normal na direção do escoamento (eixo x). Gradientes de tensão de cisalhamento ao longo do eixo r representam tensões viscosas responsáveis

por arrastar elementos de fluido por sobre a frente da bolha. Assim, estas forças atuariam no sentido de formar o revestimento hidrodinâmico sobre as paredes. Por outro lado, gradientes de tensão normal ao longo do eixo x surgem devido a forças restauradoras nas moléculas poliméricas para se opor ao esticamento na direção do escoamento. Se esses gradientes fossem negativos, eles seriam responsáveis pela diminuição da espessura do filme líquido de revestimento. No limite de baixos números de capilaridade e baixa elasticidade Ro e $Homsy$ encontraram gradientes de tensão normal negativos na direção do escoamento maiores em módulo do que os gradientes de tensão de cisalhamento, portanto prevendo que a adição de polímeros em escoamentos de deslocamento de líquidos Newtonianos por injeção de gases leva a uma redução da espessura de revestimento com relação ao caso base.

Lee *et al.* [32] também exploraram o problema de deslocar um líquido viscoelástico pela injeção de um gás. Em suas simulações numéricas eles propõem que os efeitos viscoelásticos na variação da espessura do filme líquido podem ser classificados em três regimes distintos, relacionados à faixa de número de Weissenberg coberta. Para baixos valores de We , um gradiente negativo de tensão normal forma-se a montante da região de transição do capilar à frente da bolha. Este gradiente negativo de tensão normal atuaria no sentido de impedir o escoamento de elementos de fluido na direção da velocidade da parede, ocasionando, assim, o afinamento da espessura do filme líquido. Para valores moderados de We , altos valores de gradientes positivos de tensão normal precedem altos valores de gradientes negativos de tensão normal na região de transição do capilar. Como o alto nível de tensão é rapidamente relaxado na região de transição do capilar, a espessura de líquido de revestimento permaneceria aproximadamente constante nessa faixa de parâmetros. Finalmente, para altos valores de We , uma camada limite de tensões elevadas forma-se a jusante da linha de estagnação lateral. O surgimento da camada limite de tensões faria com que o acúmulo de tensões normais fosse restrito à região do escoamento onde o filme é fino, propiciando, assim, a formação de um gradiente de tensão normal estritamente positivo na região de transição do capilar. Este gradiente atuaria no sentido de reduzir a potência da região de recirculação

por meio do arrasto de mais fluido desta para a região do filme fino, acionando, portanto, o espessamento do filme líquido.

Confrontando as conclusões de Lee *et al.* com as proposições de Ro e Homsy, observa-se que enquanto Ro e Homsy afirmam que as variações na espessura do filme líquido de revestimento resultam de uma competição entre gradientes de tensão de cisalhamento na direção radial e gradientes de tensão normal na direção axial, Lee *et al.* prevêem a variação da espessura de filme líquido baseados unicamente nas diferenças de sinais e valores dos gradientes de tensão normal na direção do escoamento. Entendemos que, quando se variam os números de capilaridade, gradientes de tensão de cisalhamento na direção radial são as forças mais importantes na formação do revestimento hidrodinâmico das paredes. Entretanto, quando estudamos a variação do filme líquido de revestimento devida unicamente à elasticidade do líquido, portanto para um número de capilaridade particular, a variação do gradiente de tensão de cisalhamento é desprezível. Logo, diríamos que a variação do filme líquido induzida pelo fenômeno da superfície livre elástica, como mostrado por Lee *et al.*, é governada unicamente pela ação de tensões normais de esticamento presentes no escoamento.

A fim de explorar o mecanismo revisitado, a variação da fração mássica de um líquido de Oldroyd-B plotada contra o número de Weissenberg, junto com a evolução das tensões poliméricas deste líquido viscoelástico, é analisada na próxima seção.

Variação da fração mássica e evolução da tensão polimérica para um líquido de Oldroyd-B

De modo geral, a eficiência do revestimento pode ser medida pela quantidade de líquido depositado na parede após a passagem de um gás deslocador. Procedemos, agora, à avaliação dos modos pelos quais a nova configuração de tensões poliméricas afeta a eficiência do revestimento quando um gás desloca um líquido viscoelástico. A fim de estudar unicamente os efeitos viscoelásticos na espessura do filme, seguimos as recomendações de Huzyak e Koelling [27] de plotar uma razão da fração mássica (adimensional) con-

tra o número de Weissenberg do escoamento. A razão da fração mássica utilizada é definida como a razão entre a massa contida no filme líquido obtida com um líquido viscoelástico (m) e aquela obtida com um líquido Newtoniano no mesmo número de capilaridade (m_N). Um valor da razão de fração mássica $m/m_N = 1,0$ implica na quantidade de líquido depositado na parede ser a mesma tanto quando o líquido deslocado é viscoelástico quanto quando é Newtoniano.

A fig.(3.9) mostra nossas previsões teóricas para a evolução da razão da fração mássica de um líquido de Oldroyd-B contra o número de Weissenberg. Os resultados são mostrados para $Ca = 0,1$. Embora os estados de escoamento sejam mostrados apenas para um único valor de Ca e Oldroyd-B seja o único modelo apresentado, sustentamos que cálculos numa larga faixa de números de capilaridade analisados com todos os modelos presentes apresentaram resultados qualitativamente semelhantes.

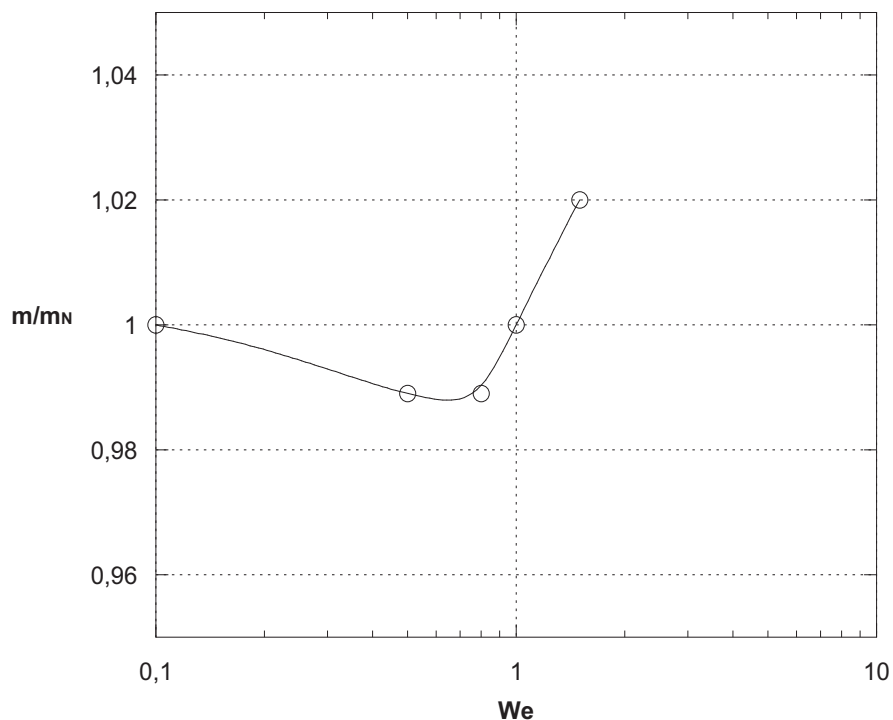


Figura 3.9: Evolução da razão da fração mássica m/m_N de um líquido de Oldroyd-B contra o número de Weissenberg para $Ca = 0,1$.

Os resultados mostrados na fig.(3.9) concordam qualitativamente com dados experimentais relatados na literatura (Huzyak e Koelling [27], por exemplo). Para baixos valores do número de Weissenberg, o filme líquido

viscoelástico apresenta uma redução na sua espessura com relação ao caso Newtoniano, e a espessura desse filme aumenta com o aumento dos valores de We .

Para elucidar este comportamento baseado na revisitação do mecanismo proposto, mostramos na fig.(3.10) a evolução da componente do tensor das tensões poliméricas tangente à linha de corrente, τ_{ptt} , com o aumento do número de Weissenberg. Decidimos plotar apenas esta componente das tensões poliméricas por entender que sua contribuição é de maior importância na variação da espessura do filme líquido. Também localizamos o anel de estagnação sobre a superfície livre usando uma coordenada da superfície livre, s , já definida.

É válido mencionar que o mais próximo que se pode chegar da causa do fenômeno de variação da espessura do filme líquido induzida pela elasticidade da superfície livre é, dada uma configuração cinemática Newtoniana, prever como as tensões elásticas serão distribuídas sobre a região do escoamento com o aumento da elasticidade. Tudo o que se segue é uma leitura baseada nesse campo de tensões.

As linhas de corrente mostradas na fig.(3.10) permitem distinguir duas regiões principais do escoamento. Uma região de grande recirculação mais próxima da linha de simetria, e uma região semelhante a um canal divergente-convergente mais próxima da parede, chamada, aqui, de região-canal. A parte divergente da região-canal é separada da região de recirculação por um anel de estagnação, que estaciona sobre a superfície livre. A parte convergente da região-canal, por sua vez, é limitada em sua borda inferior pela superfície livre.

Mesmo para uma configuração cinemática Newtoniana, um elemento de fluido movendo-se ao longo da parte divergente da região-canal experimenta gradientes de tensões adversos (que comprimem o elemento, freiando-o), sofrendo as maiores tensões compressivas próximo ao ponto de estagnação. Por outro lado, a mesma configuração cinemática Newtoniana impõe gradientes de tensões favoráveis (que esticam o elemento, acelerando-o) a elementos de fluido movendo-se ao longo da parte convergente da região-canal.

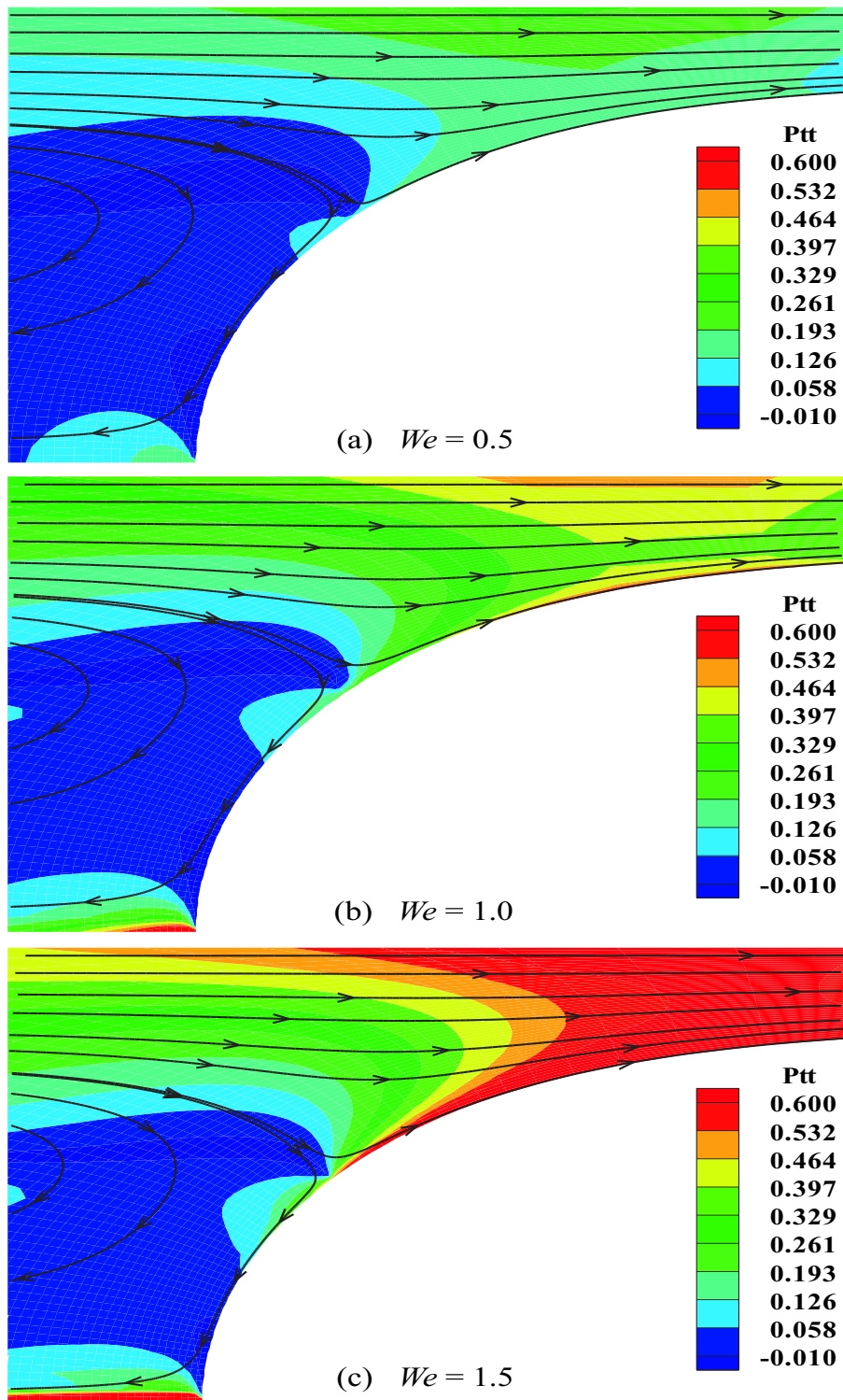


Figura 3.10: Evolução da componente do tensor das tensões poliméricas tangente à linha de corrente com o aumento do número de Weissenberg para $Ca = 0,1$. As linhas frontais representam linhas de corrente. A posição do anel de estagnação Newtoniano sobre a superfície livre é $s = 3,206$. (a) $We = 0,5$, $s = 3,211$; (b) $We = 1,0$, $s = 3,116$; (c) $We = 1,5$, $s = 2,795$.

Dado este panorama de configuração cinemática de um fluido Newtoniano, é razoável dizer que a elasticidade atua no sentido de incrementar os efeitos de frenagem/aceleração sofridos por um elemento de fluido movendo-se ao longo das partes divergente/convergente da região-canal.

Sabemos que a elasticidade induz uma variação na espessura do filme líquido de revestimento. Segue uma explicação razoável. Como o revestimento está completamente contido na parte convergente da região-canal, que faz fronteira com a superfície livre, a variação na espessura do filme líquido só pode estar associada a uma troca de massa entre a parte divergente da região-canal e a região de recirculação. No entanto, essas duas regiões são separadas por um anel de estagnação que, em regime permanente de escoamento, é impermeável. Quando a elasticidade da solução é variada, ou pela incorporação de material polimérico ao líquido Newtoniano ou pela variação do número de Weissenberg do escoamento, o balanço de forças na solução inteira é alterado. Enquanto moléculas poliméricas estão sendo rearranjadas para adquirir um novo estado de equilíbrio, um regime transiente se estabelece. Durante este intervalo de desequilíbrio a fronteira entre a região-canal e a região de recirculação torna-se perfeitamente permeável. É então que ocorre a troca de massa responsável por aumentar ou diminuir a espessura do filme líquido depositado sobre a parede.

Com isso em mente passamos à análise da fig.(3.10).

Para $We = 0, 1$ vemos apenas um pequeno desvio do caso Newtoniano de referência ($Ca = 0, 1, We = 0$), e a magnitude de τ_{ptt} é aproximadamente zero em todo o campo de escoamento. A posição do anel de estagnação sobre a superfície livre é coincidente à posição no caso Newtoniano (fig.(3.9)), e não há razão para haver variação da espessura do filme líquido depositado na parede do capilar.

O campo de tensões elásticas na fig.(3.10a) mostra que elementos de fluido movendo-se na parte divergente da região-canal criada pela linha de corrente côncava imediatamente acima do anel de estagnação adentram regiões onde existem gradientes de tensão polimérica adversos, enquanto elementos de fluido que procedem para a parte convergente da região-canal são

acelerados devido ao adentramento em regiões de gradiente de tensão polimérica favorável. Para manter a coerência com os resultados da fig.(3.9), que mostra um decréscimo na espessura do filme líquido neste nível de número de Weissenberg, raciocinamos que alguma quantidade de elementos de fluido não superou o gradiente de tensão adverso, retornando e penetrando na região de recirculação, aumentando sua potência, deslocando o anel de estagnação mais para jusante sobre a superfície livre e, conseqüentemente, diminuindo a massa de líquido que entra na região de escoamento do filme. Como os valores de tensão elástica são pequenos neste número de Weissenberg, seria mesmo de se esperar apenas uma leve redução do filme líquido.

Para $We = 0,8$ não há nenhuma modificação da espessura do filme de revestimento com relação à situação em que $We = 0,5$ (fig.(3.9)). Este é o platô sugerido por Lee *et al.*, onde o alto nível de tensão na região de transição do capilar é rapidamente relaxado.

De acordo com a fig.(3.10b), aumentar a elasticidade do fluido força as regiões de baixas tensões normais de esticamento a se moverem em direção à região de recirculação. Confinando a região de gradiente de tensão adverso a uma porção pequena da parte divergente da região-canal, e aumentando ainda a intensidade do gradiente de tensão favorável na parte convergente da região-canal, permite aumentar a quantidade de elementos de fluido que procedem à região de escoamento do filme líquido, arrastando junto ainda mais fluido da região de recirculação. Tudo isso atua no sentido de diminuir a potência da região de recirculação, deslocando o anel de estagnação em direção à ponta da bolha, resultando no aumento da espessura do revestimento, como observado na fig.(3.9).

Finalmente, para $We = 1,5$ e valores crescentes vemos que a porção da região de baixas tensões de esticamento é cada vez mais confinada a uma pequena porção da região de recirculação, onde também surgem regiões de tensões crescentes. Seguindo o último raciocínio, o anel de estagnação deve se mover cada vez mais em direção à ponta da bolha (fig.(3.10c)), arrastando mais fluido para dentro da região de filme líquido e, portanto, aumentando a espessura do revestimento (fig.(3.9)).

3.5.2

Espessura do revestimento

Agora que examinamos uma interpretação física do fenômeno de variação da espessura do revestimento usando um modelo de halteres Hookeanos (Oldroyd-B), prosseguimos com a investigação tentando correlacionar o comportamento de interfaces viscoelásticas às propriedades físicas dos líquidos de revestimento pela exploração de dois outros modelos de halteres não Hookeanos (os modelos FENE-P e FENE-CR).

Efeitos do parâmetro de extensibilidade na espessura do revestimento

O parâmetro b que aparece em modelos de halteres não Hookeanos é responsável por controlar a extensibilidade da molécula polimérica. Atribuir um baixo valor a b significa modelar as moléculas poliméricas como bastões rígidos, que não podem atingir altas tensões. Aumentar o valor de b implica em aumentar a extensibilidade da molécula, permitindo que a solução atinja maiores valores nas tensões poliméricas. Isto pode ser constatado no gráfico da máxima componente de esticamento do tensor das tensões poliméricas na superfície livre com relação ao número de Weissenberg, conforme mostrado na fig.(3.11). Além de evidenciar que altas tensões poliméricas de esticamento são alcançadas com o aumento do parâmetro de extensibilidade em ambos os modelos, cada curva mostra um comportamento semelhante: uma pequena inclinação da curva em baixos números de Weissenberg independente dos valores do parâmetro de extensibilidade, divergindo para uma aguda inclinação em números de Weissenberg moderados, e mostrando, ao fim da simulação, uma tendência para atingir um patamar constante.

A fig.(3.12) mostra uma comparação entre campos da componente de esticamento do tensor das tensões poliméricas de uma solução de FENE-P composto por moléculas poliméricas de baixa extensibilidade ($b = 20$) e outros compostos por moléculas poliméricas de alta extensibilidade ($b = 100$). Analisando os campos, notamos que um menor valor do parâmetro de

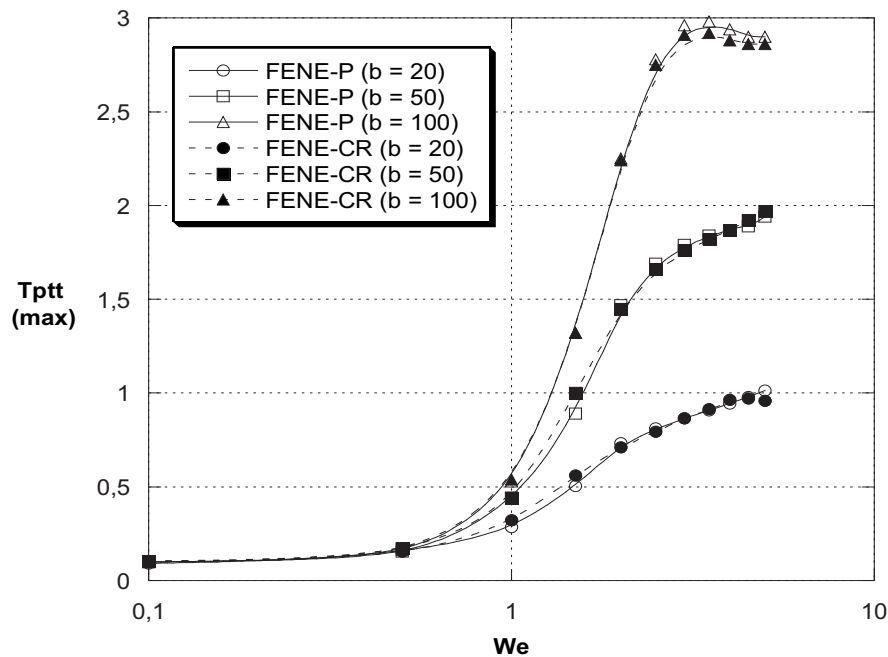


Figura 3.11: Efeito da variação do parâmetro de extensibilidade da molécula sobre a máxima componente de esticamento do tensor das tensões poliméricas na superfície livre. Resultados para $Ca = 0, 1$.

extensibilidade não apenas limita o alcance máximo de tensões a baixos níveis (fig.(3.11)), como também atua no retardo da formação de uma camada limite de tensões elásticas sobre a superfície livre.

O efeito da variação do parâmetro de extensibilidade na espessura do filme líquido para um número de capilaridade particular, $Ca = 0, 1$, é mostrado na fig.(3.13). As comparações são feitas entre o modelo FENE-CR, na fig.(3.13a), e o modelo FENE-P, na fig.(3.13b). Aqui, seguimos a recomendação de Herrchen [21], que usa valores do parâmetro de extensibilidade tais como $b = 20, 50, 100$, argumentando que 20 é o limite mínimo que possui algum significado físico e valores acima de 100 causariam modificações pouco significativas se comparadas ao modelo de halteres Hookeanos (ou Oldroyd-B). Resultados obtidos com o modelo Oldroyd-B são apresentados em ambas as comparações a fim de estabelecer o limite superior da extensibilidade da molécula. Como a convergência depende da extensibilidade da molécula, simulações para o modelo baseado numa molécula infinitamente extensível, Oldroyd-B, não puderam avançar além de $We = 1, 5$.

Para baixos números de Weissenberg ambos os modelos apresentam

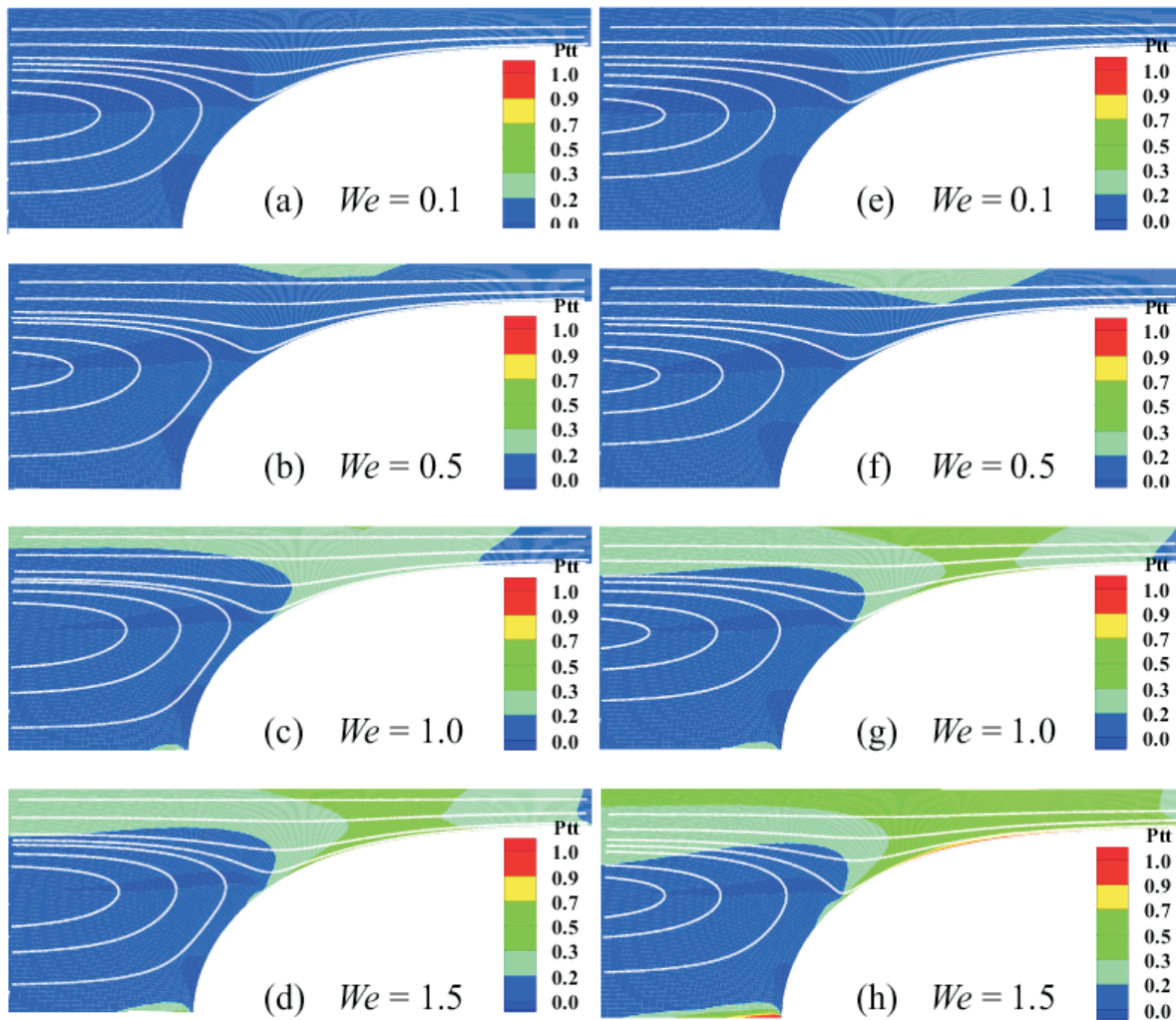


Figura 3.12: Campos da componente de esticamento do tensor das tensões poliméricas de uma solução de FENE-P ao longo das linhas de corrente em função de We para $Ca = 0, 1$. Linhas frontais representam linhas de corrente. (a)-(d) $b = 20$; (e)-(h) $b = 100$.

uma diminuição da espessura do filme líquido com relação ao caso Newtoniano, qualquer que seja o valor do parâmetro de extensibilidade b . Este resultado pode ser explicado raciocinando de acordo com o mecanismo revisitado de diminuição da espessura do revestimento, e também sugere que, neste nível de elasticidade, o gradiente adverso de tensão de esticamento impõe o mesmo efeito tanto em líquidos pseudoplásticos (FENE-P) quanto em líquidos de Boger (FENE-CR).

Diferenças no comportamento dos modelos surgem apenas com o aumento do número de Weissenberg. Soluções de FENE-CR compostas por moléculas poliméricas de alta extensibilidade ($b = 100$) apresentam um

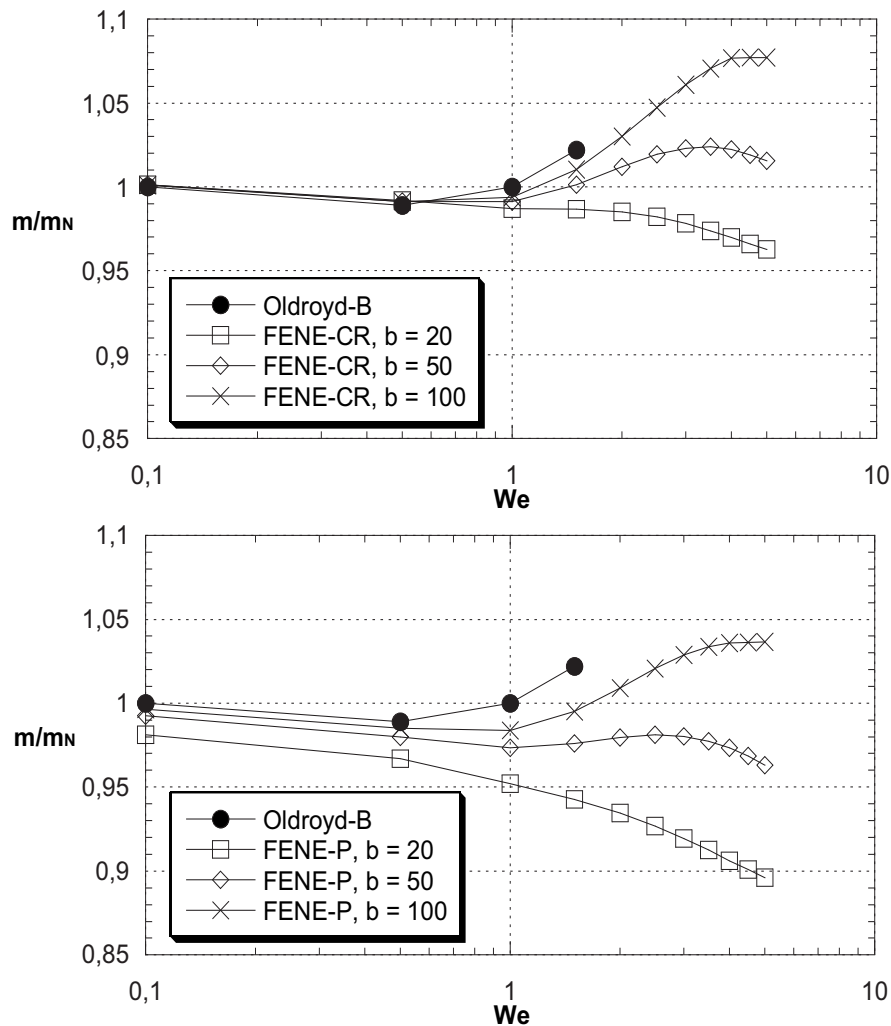


Figura 3.13: Efeitos de variação do parâmetro de extensibilidade da molécula na espessura de filme líquido. Resultados para $Ca = 0, 1$. (a) Modelo FENE-CR; (b) Modelo FENE-P.

aumento da espessura do filme líquido para valores crescentes de We , mas atingem um platô em $We \geq 4,0$. Soluções de FENE-CR com moléculas de extensibilidade mediana ($b = 50$) ainda apresentam um aumento da espessura do filme líquido para valores crescentes de We , e também atingem um platô após $We \geq 2,5$. A representante das soluções de FENE-CR composta por moléculas poliméricas de baixa extensibilidade ($b = 20$) adquire um comportamento oposto, deixando seu platô de espessura de revestimento mais fina em baixos valores de We para seguir afinando ainda mais com o aumento do We . O aumento da espessura de revestimento neste nível de We é relacionado ao estabelecimento de uma camada limite de tensão sobre a superfície livre, como concluído por Lee *et al.* [32], e o platô

de espessura pode ser associado à tendência assintótica mostrada pelos máximos valores das componentes de esticamento do tensor das tensões poliméricas sobre a superfície livre (veja a fig.(3.11)).

Esta variação não-monotônica da espessura do filme líquido na parede do capilar com o número de Weissenberg não foi relatada nos estudos anteriores de Huzyak e Koelling [27], para tubos capilares, nem nos estudos de Lee *et al.* [32], para deslocamentos planares. Ela pode ser explicada, como descrito anteriormente, pela competição entre o gradiente de tensão normal compressiva na parte divergente da região-canal, que tende a diminuir a espessura do filme líquido, e o gradiente de tensão normal trativa na parte convergente da região-canal, que tende a aumentar a espessura do filme líquido. A fig.(3.14) mostra a componente do tensor das tensões poliméricas ao longo de uma linha de corrente localizada fora da região de recirculação e próxima à linha de corrente divisória que termina no ponto de estagnação na superfície livre, como indicado na figura. As previsões são para $b = 50$ e $We = 1,5, 3,0, 4,0$ e $5,0$. s é uma coordenada da superfície livre. As regiões de gradiente de tensão negativo e positivo estão assinaladas na figura. À medida que We aumenta de 1,5 para 3,0, o gradiente de tensão positivo cresce, conforme já explicado. Isto leva a um grande espessamento do filme líquido depositado na parede do capilar. Com o contínuo crescimento de We , de 3,0 para 5,0, o gradiente de tensão positivo permanece virtualmente constante, entretanto o gradiente de tensão negativo, a montante da região do filme líquido, torna-se mais forte, levando a um menor espessamento do filme líquido na parede.

Resultados para soluções de FENE-P de moléculas poliméricas de alta extensibilidade e de moléculas poliméricas de baixa extensibilidade são qualitativamente semelhantes aos seus correspondentes no modelo FENE-CR. Porém, ao invés de apresentar um espessamento para crescentes números de Weissenberg, as soluções de FENE-P de moléculas poliméricas medianamente extensíveis mantêm constante seu comportamento mais fino com relação ao caso Newtoniano.

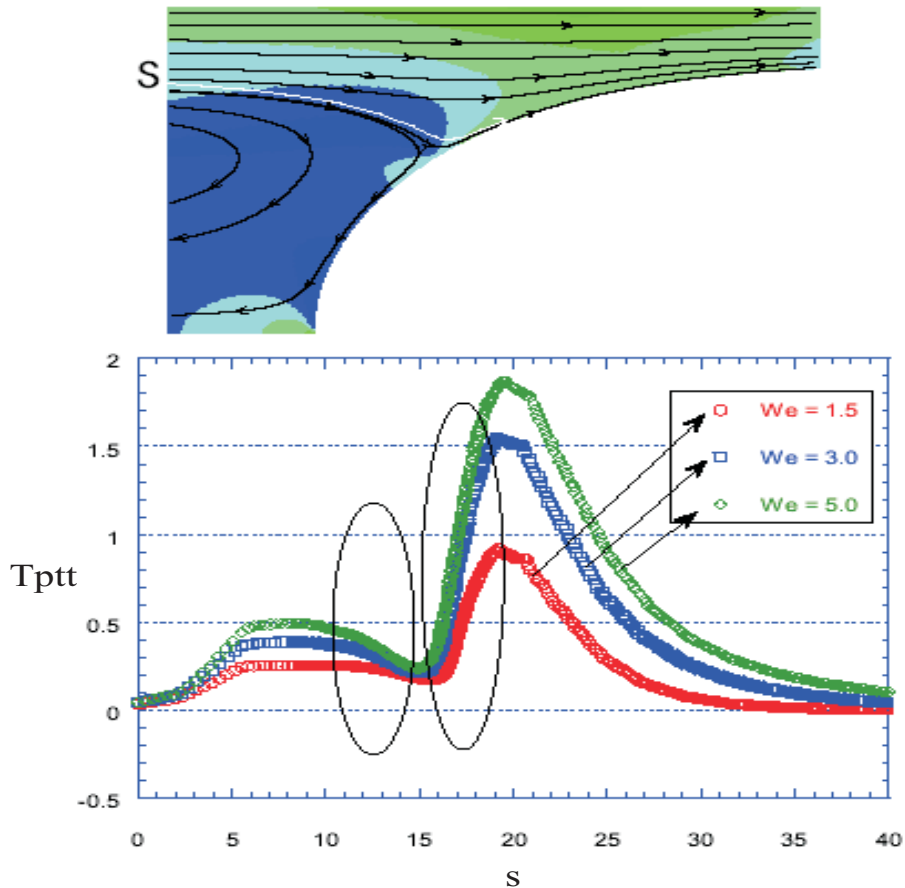


Figura 3.14: Componente normal do tensor das tensões poliméricas ao longo de uma linha de corrente adjacente à linha de corrente que termina no ponto de estagnação na superfície livre, conforme indicado na figura. As previsões foram obtidas com o modelo FENE-CR e são apresentadas como função do número de Weissenberg, para $Ca = 0,1$.

Efeitos pseudoplásticos na espessura do revestimento

Mostrar no mesmo gráfico resultados dos modelos FENE-P e FENE-CR permite avaliar quão importantes são os efeitos pseudoplásticos na variação da espessura do filme líquido. Primeiramente capacitamos ambos os modelos com um parâmetro de extensibilidade de igual valor, o que permite que potencialmente ambos os modelos sejam capazes de sustentar o mesmo nível de tensão (como pode ser visto na fig.(3.15)).

Prosseguindo com a análise, a fig.(3.16) mostra os efeitos das soluções poliméricas mencionadas acima na espessura de revestimento. Notamos que o espessamento é reduzido no modelo FENE-P com relação ao modelo FENE-CR, e seu estabelecimento só se dá num valor mais elevado do

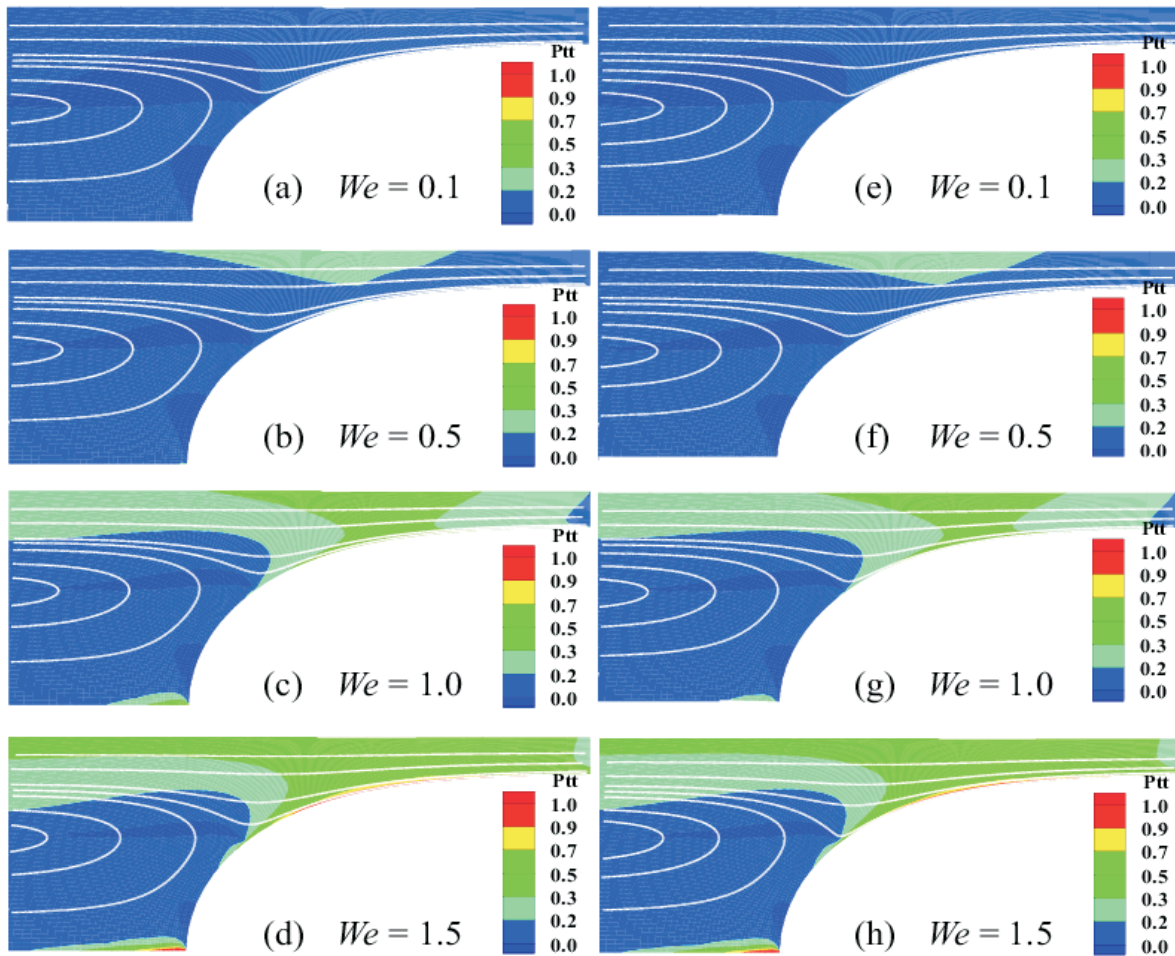


Figura 3.15: Componentes do tensor das tensões poliméricas dos modelos FENE-P e FENE-CR ao longo das linhas de corrente em função de We para $Ca = 0, 1$. Linhas frontais representam linhas de corrente. Resultados para $b = 100$. (a)-(d) Modelo FENE-CR; (e)-(h) Modelo FENE-P.

número de Weissenberg. Concluímos que, por apresentar características pseudoplásticas, líquidos de FENE-P não são capazes de sustentar valores de tensão polimérica do mesmo nível que líquidos de FENE-CR sustentam, e esta relaxação afeta a eficiência de revestimento na forma mostrada na fig.(3.16).

Comparação com dados da literatura

Huzyak e Koelling [27] realizaram experimentos para investigar a penetração de uma longa bolha através de um líquido viscoelástico em um tubo capilar. Em seu trabalho, foram apresentados resultados para quatro

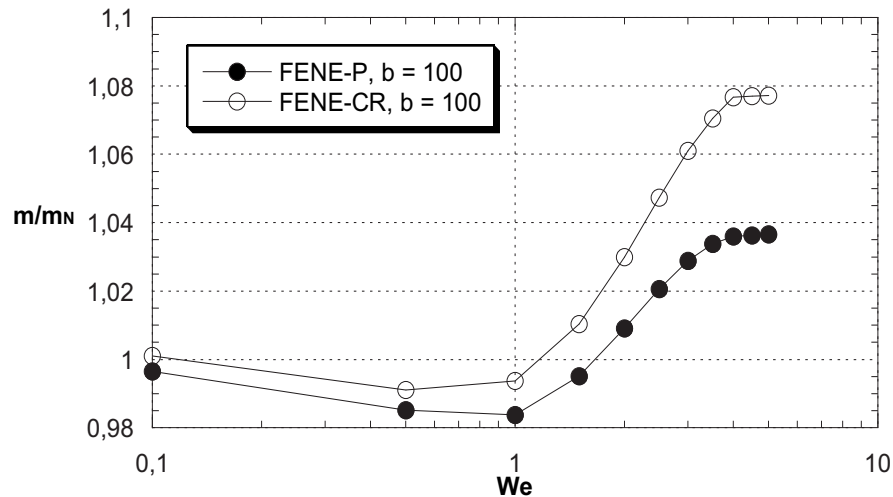


Figura 3.16: Efeitos pseudoplásticos na espessura do filme líquido.

fluidos de teste com propriedades reológicas projetadas de forma a isolar os efeitos da elasticidade do líquido de efeitos pseudoplásticos (líquidos de Boger). A fim de comparar seus dados experimentais com nossas previsões teóricas, mostramos na fig.(3.17) a evolução da razão da fração mássica com o número de Weissenberg. Dados experimentais correspondentes a um dos líquidos viscoelásticos desenvolvidos por Huzyak e Koelling (B-35) são confrontados com nossas previsões teóricas para um líquido de FENE-CR com $b = 150$ a $Ca = 0,1$. O modelo FENE-CR foi escolhido por ser o mais apropriado para ajustar dados relativos a um líquido de Boger.

A concordância entre os resultados experimentais de Huzyak e Koelling e as previsões teóricas relacionadas aqui é boa. Para baixos números de Weissenberg, $We < 0,3$, a razão da fração mássica indica que o comportamento do líquido é essencialmente Newtoniano. Para $0,3 < We < 1$, a espessura de filme líquido depositado na parede quando o líquido viscoelástico é deslocado é levemente menor que a espessura no caso Newtoniano. A espessura mínima atingida pelos dados de Huzyak e Koelling é 3,5% menor do que no caso Newtoniano, enquanto que nossa simulação apresenta uma espessura apenas 1% menor. Para altos valores do número de Weissenberg, $We > 1$, a quantidade de líquido depositado na parede cresce à medida que o líquido se torna mais viscoelástico. Para $We = 5$, nossa simulação apresenta um resultado máximo 13% mais espesso que o caso Newtoniano,

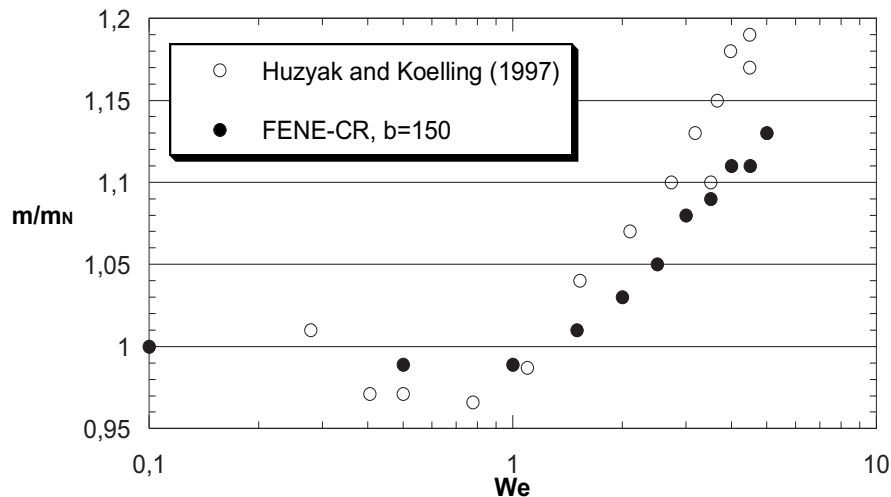


Figura 3.17: Evolução da razão da fração mássica m/m_N com We . Os círculos correspondem aos dados experimentais viscoelásticos obtidos por Huzyak e Koelling, enquanto que os quadrados correspondem aos dados da simulação numérica de um modelo FENE-CR com $b = 150$ para $Ca = 0,1$.

enquanto que a espessura máxima apresentada pelos dados de Huzyak e Koelling é 19% maior que o caso Newtoniano.

Nós realizamos muitas simulações numéricas do modelo de FENE-CR para diferentes valores do parâmetro b , responsável pela máxima extensibilidade da molécula polimérica. Embora a maioria dos casos convergidos tenha apresentado um comportamento qualitativo semelhante (diminuição da razão da fração mássica para baixos valores de We e crescimento da razão da fração mássica para altos valores de We), observamos que nossos resultados se aproximaram dos resultados de Huzyak e Koelling para crescentes valores de b . Por outro lado, valores crescentes de b permitem atingir tensões poliméricas máximas mais elevadas no escoamento. Parece haver uma limitação na convergência relacionada aos valores de tensão polimérica obtidos. Esta limitação foi atingida em nossa simulação para $b = 150$. De qualquer forma, a tendência mostrada pelo modelo FENE-CR de ajustar os dados experimentais disponíveis esteve sempre correta, e provavelmente ajustaria perfeitamente para um valor do parâmetro b verdadeiramente representativo da extensibilidade da molécula polimérica do fluido de Boger desenvolvido por Huzyak e Koelling.